



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
PROGRAMA DE MAESTRÍA Y DOCTORADO EN INGENIERÍA
INGENIERÍA ELÉCTRICA – CONTROL

ESTUDIO TEÓRICO DE LA DINÁMICA NO LINEAL
DE UN GASIFICADOR EN CONFIGURACIÓN IMBERT

TESIS
QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:
DOCTOR EN INGENIERÍA

PRESENTA:
LUIS ÁNGEL SANTAMARÍA PADILLA

TUTORES PRINCIPALES
DR. LUIS AGUSTÍN ÁLVAREZ-ICAZA LONGORIA, II-UNAM
DR. JESÚS ÁLVAREZ CALDERÓN, UAMI

COMITÉ TUTOR
DRA. MARÍA CRISTINA VERDE RODARTE, II-UNAM
DR. JAIME ALBERTO MORENO PÉREZ, II-UNAM
DR. WILLIAM VICENTE Y RODRÍGUEZ, II-UNAM
CIUDAD UNIVERSITARIA, CIUDAD DE MÉXICO, JUNIO 2022



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

JURADO ASIGNADO:

Presidente: Dra. María Cristina Verde Rodarte

Secretario: Dr. Jaime Alberto Moreno Pérez

1er. Vocal: Dr. Luis Agustín Álvarez-Icaza Longoria

2do. Vocal: Dr. Jesús Álvarez Calderón

3er. Vocal: Dr. William Vicente y Rodríguez

La tesis se realizó en el Instituto de Ingeniería, UNAM.

TUTORES DE TESIS:

Dr. Luis Agustín Álvarez-Icaza Longoria

Dr. Jesús Álvarez Calderón

Para Angy. Gracias por creer en mi y compartir este gran amor...

Agradecimientos

A mi familia y amigos, en especial a Vale, por su amor, apoyo y motivación a lo largo de estos años.

Al Dr. Ulises Badillo, por su amistad, colaboración y paciencia, así como por el apoyo en el manejo del software para realizar simulaciones de continuación numérica.

A mis asesores, los Dres. Luis Álvarez-Icaza y Jesús Álvarez, por su invaluable apoyo, guía y amistad. Gracias por sus consejos, paciencia y dedicación. Son un gran ejemplo para mí por su calidad como personas, profesores e investigadores.

A los miembros del jurado por el tiempo dedicado a la revisión de mi trabajo, por sus valiosas observaciones y recomendaciones que ayudaron a mejorar su presentación.

Al Instituto de Ingeniería, por el acceso a sus instalaciones, a la planta piloto de gasificación para la realización de experimentos y al cluster Tonatiuh para realizar simulaciones.

Al CONACYT y al proyecto UNAM-PAPIIT-IT101420, por las becas asignadas.

Resumen

En esta tesis se aborda el problema de estudiar la dinámica no lineal global (es decir, multiplicidad de estados estacionarios, bifurcación y comportamiento transitorio) de un gasificador de biomasa en configuración Imbert, el cual forma parte de sistemas de gasificación comerciales de escala piloto. El estudio se realiza con base en:

- El modelado del gasificador en ecuaciones diferenciales parciales (EDP).
- La discretización eficiente del dominio espacial del modelo en EDP.
- La aplicación de análisis de bifurcación mediante continuación numérica transdimensional con respecto al orden del modelo.
- El análisis de la respuesta transitoria al arranque y ante perturbaciones tipo pulso cuando opera en estado estacionario.

Los resultados obtenidos en el estudio del gasificador demuestran que:

- El modelo describe adecuadamente los datos experimentales en el EE de interés.
- Posee 5 EEs para condiciones nominales de operación, de los cuales 3 son estables (nominal, de rejilla y extinción) y 2 inestables (de alta y baja conversión).
- Distintas combinaciones de valores del contenido de humedad en la biomasa y el flujo de aire suministrado, provocan que se modifique el tipo de multiplicidad de EEs que exhibe (mono, bi o triestable).
- Cuando se encuentra en el EE nominal, la operación es robustamente estable ante cambios en el contenido de humedad en la biomasa y/o flujo de aire suministrado.
- Dependiendo del tipo de multiplicidad que posea, el comportamiento transitorio se ve afectado al arranque y ante perturbaciones en el flujo de aire.

Abstract

The problem on the study of the nonlinear dynamics (namely multiplicity of steady states, bifurcation, and transient behavior) of an Imbert-type biomass gasifier, present in many pilot-scale gasification systems, is addressed in this thesis. The solution to the problem is obtained by:

- The modeling on partial differential equations (PDE) of the reactor.
- The efficient discretization of the spatial domain of the PDE model.
- Bifurcation analysis by means of transdimensional numerical continuation on the basis of an efficient model order.
- The analysis of the transient response due to pulse-type disturbances on the air feed flow and startup.

The results obtained from the study demonstrate that:

- The experimental data at steady state (SS), is adequately described with the proposed model.
- At nominal operation conditions, the reactor possesses 5 SSs: 3 stable (called nominal, grate and extinction) and 2 unstable (called of high and low conversion).
- Depending on the biomass moisture content and the air feed flow, the multiplicity pattern (mono, bi or tristability) changes.
- When the gasifier operates at nominal feed conditions, the nominal SS is robustly stable against biomass moisture content and air feed flow variations.
- Depending on the multiplicity pattern of the gasifier, the transient behavior is affected due to disturbances on the air feed flow and at the startup.

ÍNDICE GENERAL

1. Introducción	1
1.1. Motivación	1
1.2. Planteamiento del problema	4
1.2.1. Objetivos específicos	4
1.2.2. Metodología	4
1.3. Contribuciones de la tesis	5
1.4. Organización de la tesis	6
1.5. Lista de publicaciones	7
2. Modelado del gasificador	9
2.1. Gasificación de biomasa	9
2.1.1. Reactor de gasificación	10
2.1.2. Sistema de gasificación	11
2.2. Modelo de gasificador con intercambiador de calor integrado	14
2.2.1. Ecuaciones constitutivas de reactor	14
2.2.2. Ecuaciones del precalentador de aire	15
2.2.3. Modelo resultante al aplicar suposiciones estándar	18
2.2.4. Comparación del modelo propuesto frente a la literatura	21
2.3. Contribuciones del Capítulo	22
3. Modelo computacional	23
3.1. Representaciones generales del gasificador con precalentamiento de aire	23
3.1.1. Modelo de dimensión infinita	23
3.1.2. Modelo de dimensión finita	25
3.2. Formulación técnica del problema	28
3.3. Modelado de la dinámica no lineal mediante discretización eficiente	28
3.3.1. Descripción de conjuntos límite	29
3.3.2. Descripción de conjuntos límite y comportamiento transitorio	30
3.4. Caso de estudio	31
3.5. Contribuciones de Capítulo	32

4. Régimen estacionario	33
4.1. Operación nominal	33
4.1.1. Calibración de parámetros	33
4.1.2. Orden eficiente N_{exp}	34
4.1.3. Comparación con datos experimentales	36
4.2. Multiplicidad de estados estacionarios	37
4.2.1. Orden eficiente N_S	37
4.2.2. Comparación entre EEs en condiciones nominales	38
4.2.3. Trayectorias desde EEs inestables perturbados	41
4.3. Contribuciones del Capítulo	43
5. Análisis de bifurcación	45
5.1. Bifurcación con respecto al contenido de humedad en la biomasa (CHB) . .	45
5.2. Bifurcación con respecto al flujo de aire suministrado (FAS)	47
5.2.1. Casos con bajo y alto contenido de humedad	49
5.3. Contribuciones del capítulo	50
6. Régimen transitorio	51
6.1. Modelado del comportamiento transitorio	51
6.1.1. Trayectorias de referencia	51
6.1.2. Orden eficiente N_t	53
6.2. Robustez ante perturbaciones en flujo de aire	53
6.2.1. Pulsos de aire aplicados en EE nominal	53
6.2.2. Pulsos de aire aplicados en EE de rejilla	58
6.3. Arranque	59
6.4. Contribuciones del Capítulo	61
7. Conclusiones	63
7.1. Trabajo futuro	64
A. Modelado de sistema	65
A.1. Velocidades de reacción y conductividad térmica	65
A.2. Coeficientes de transferencia de energía en precalentador de aire	66
A.3. Indicadores de desempeño de operación del gasificador	69
B. Normas de errores	71
B.1. Para ajuste experimental	71
B.2. Para descripción de conjuntos límite	72
B.3. Para descripción de comportamiento transitorio	73
Referencias	75

ÍNDICE DE FIGURAS

2.1. Unidades requeridas para llevar a cabo el proceso de gasificación	10
2.2. Reactores con flujos concurrentes	11
2.3. Componentes en sistema de gasificación de All Power Labs	12
2.4. Gasificador Imbert con precalentamiento de aire	13
2.5. Vista lateral de gasificador	17
4.1. Orden eficiente N_{exp} para descripción de datos experimentales	36
4.2. Comparación de modelos de orden N_{exp} y N_{pde} contra datos experimentales	36
4.3. Orden eficiente N_S para descripción de conjuntos límite	38
4.4. Conjunto de perfiles en EE con condiciones nominales de operación: Tem- peratura, componentes sólidas y flujo de gas	39
4.5. Conjunto de perfiles en EE con condiciones nominales de operación: com- ponentes gaseosas	40
4.6. Trayectorias desde la vecindad del EE inestable $\bar{\mathbf{x}}_H^u$	42
4.7. Trayectorias desde la vecindad del EE inestable $\bar{\mathbf{x}}_L^u$	42
5.1. Diagrama de bifurcación con respecto CHB	47
5.2. Diagrama de bifurcación con respecto a FAS	49
5.3. Diagramas de bifurcación con respecto a flujo de aire, para 2 y 15 % de humedad	49
6.1. Perturbación tipo pulso en el FAS (disminución)	52
6.2. Orden eficiente N_t para descripción de comportamiento transitorio.	53
6.3. Trayectoria $\mathbf{x}_1(t)$: inicia y finaliza en $\bar{\mathbf{x}}$	54
6.4. Trayectoria $\mathbf{x}_2(t)$: inicia en $\bar{\mathbf{x}}$ y finaliza en $\bar{\mathbf{x}}_G$	55
6.5. Trayectoria $\mathbf{x}_3(t)$: inicia en $\bar{\mathbf{x}}$ y finaliza en $\bar{\mathbf{x}}_E$	56
6.6. Respuesta a pulsos con decremento en el flujo de aire: plano amplitud- duración de pulso	57
6.7. Respuesta a decremento en flujo de aire a 0 kg/h por 30 min	57
6.8. Perturbación tipo pulso en el FAS (incremento)	58
6.9. Trayectoria $\mathbf{x}_4(t)$: inicia en $\bar{\mathbf{x}}_G$ y finaliza en $\bar{\mathbf{x}}$	59
6.10. Evolución de ϑ y η_{gf} , para trayectoria $\mathbf{x}_4(t)$	59
6.11. Trayectorias de arranque $\mathbf{x}_I(t)$, $\mathbf{x}_G(t)$ y $\mathbf{x}_E(t)$	61

ÍNDICE DE TABLAS

1.1. Estado del arte en modelado de gasificadores Imbert	3
2.1. Trabajos con sistemas de gasificación de All Power Labs	13
2.2. Reacciones químicas y velocidades de reacción.	16
2.3. Coeficientes de matriz estequiométrica \mathbf{S}	20
3.1. Rango de valores y valor nominal de parámetros de alimentación	31
3.2. Dimensiones de gasificador Imbert bajo estudio	31
3.3. Instrumentación de gasificador	32
4.1. Parámetros nominales, calibrados y su incertidumbre	35
4.2. Comparación de gas de síntesis a la salida del reactor	37
4.3. 5 EEs en la operación nominal	38
4.4. Comparación de la composición del gas de síntesis a la salida del reactor para los 5 EEs	41
5.1. Resultados de análisis de bifurcación con respecto al contenido de humedad	47
5.2. Resultados de análisis de bifurcación con respecto al flujo de aire	48
A.1. Velocidades de reacción y parámetros.	67
A.2. Propiedades de materiales del intercambiador de calor	68
A.3. Dimensiones de precalentador de aire	69

En este Capítulo se motiva y presenta, frente a la literatura pertinente, el objeto de análisis de esta tesis: el estudio de la dinámica no lineal de reactores de gasificación Imbert con precalentamiento de aire. Se enuncian las contribuciones derivadas del estudio, así como la lista de trabajos escritos que se realizaron durante la investigación.

1.1. Motivación

La *gasificación* es un proceso termoquímico que transforma materiales orgánicos en carbonizado y *gas de síntesis* (Speight, 2020), se desarrolla en reactores tubulares (*gasificadores*) y ha demostrado ser la mejor forma de obtener hidrógeno a partir de biomasa (Ahmad, Zawawi, Kasim, Inayat, y Khasri, 2016), además de ser una tecnología atractiva para la gestión y eliminación de residuos con generación de energía (McKendry, 2002). De trabajos experimentales (Sansaniwal, Pal, Rosen, y Tyagi, 2017), se ha observado que la calidad del gas de síntesis que se produce depende del tipo de biomasa y gasificador utilizados, siendo el reactor de gasificación en configuración Imbert el preferido en sistemas de flujos concurrentes (que van en la misma dirección) de escala piloto e industrial (Dogru, Mirdilli, y Howarth, 2002; Guangul, Sulaiman, y Ramli, 2014; Montuori, Vargas-Salgado, y Alcázar-Ortega, 2015; Shen, Li, Yao, Cui, y Wang, 2019).

De estudios en modelado de reactores tubulares (Badillo-Hernandez, Alvarez, y Alvarez-Icaza, 2019; Heinemann y Poore, 1981; Jaree et al., 2003; Morud y Skogestad, 1998; Puszynski y Hlaváček, 1980) se sabe que:

- Su operación se ve afectada por fenómenos no lineales globales, como son la multiplicidad de estados estacionarios (EE), ciclos límite y bifurcación (creación o destrucción de EEs y/o ciclos límite) por cambios en entradas o parámetros del sistema.
- Para reactores exotérmicos con varios perfiles de estado (más de 3), la evaluación de los conjuntos límite (EEs y ciclos límite) mediante la aplicación directa de métodos numéricos estándar para resolver ecuaciones diferenciales parciales (EDP) y de software para análisis de bifurcación basado en continuación numérica (Doedel, Keller, y Kernevez, 1991; Govaerts et al., 2011; Kuznetsov, 1998) conlleva una gran carga computacional que crece rápidamente con el orden de la discretización espacial realizada, así como con la complejidad de los conjuntos límite existentes, por lo cual

la solución numérica puede convertirse en una tarea muy difícil e incluso irresoluble (Allgower y Georg, 1990; Bindel, Friedman, Govaerts, Hughes, y Kuznetsov, 2014).

Las dificultades descritas en el segundo punto, han sido superadas recientemente con el *enfoque de modelado eficiente para reactores tubulares* propuesto por Badillo-Hernandez et al. (2019), que fue probado para un reactor de gasificación estratificado con 12 perfiles. Este enfoque parte del uso de representaciones de bajo orden (comparando con resolvedores estándar de EDP) basados en el esquema de modelado por celdas o etapas (Deans y Lapidus, 1960; Levenspiel y Bischoff, 1964), en combinación con un criterio para elegir el tamaño de la discretización del modelo en EDP para obtener una representación en ecuaciones algebraico-diferenciales (EAD) que sea cuantitativamente confiable sin que se:

- Sobremodele el sistema (debido a sobrediscretización) a la luz de incertidumbre en los parámetros en la cinética química (Deans y Lapidus, 1960).
- Modifiquen los conjuntos límite por subdiscretización (Bizon, Continillo, Russo, y Smuła, 2008; Lafon y Yee, 1996; Liu y Jacobsen, 2004) o sobrediscretización (Jensen y Ray, 1982).

De acuerdo a Safarian, Unnthórsson, y Richter (2019), el modelado de reactores de gasificación en general considera:

- Transferencia de masa y energía.
- Dinámica de fluidos multifásica.
- Transporte químico.
- Múltiples reacciones químicas (homogéneas y heterogéneas).

Las revisiones del estado del arte en técnicas de modelado de gasificadores (Puig-Arnavat, Bruno, y Coronas, 2010; Ramos, Monteiro, y Rouboa, 2019; Ferreira, Monteiro, Brito, y Vilarinho, 2019), reportan que los más utilizados son:

- Cinéticos.
- Equilibrio termodinámico.
- Dinámica de fluidos computacional (CFD, por sus siglas en inglés).
- Aspen Plus.
- Redes neuronales artificiales.

La cantidad de trabajos que han desarrollado modelos computacionales de gasificadores en configuración Imbert es reducida, esto se puede deber a que presentan una geometría y un patrón de flujo complejos. En la Tabla 1.1 se presenta la revisión del estado del arte en el modelado de gasificadores Imbert de escala piloto y se observa que se han empleado diversas técnicas computacionales para su implementación. Adicionalmente, se puede decir que los autores:

- Se han enfocado en reproducir la operación nominal en EE de su gasificador.
- Evalúan el proceso en términos energéticos.
- Omiten el modelado de algunos fenómenos de transferencia de energía (pérdidas con el ambiente y/o precalentamiento de aire).
- No estudian el comportamiento transitorio del sistema, a excepción de Yucel y Hashtaoglu (2016) que describe una trayectoria de arranque.

Tabla 1.1: Estado del arte en modelado de gasificadores Imbert

Referencia	Escala	Modelo computacional	Solución
Yucel y Hastaoglu (2016)	Piloto 10 kW	Unidimensional con 17 EDPs	Discretización por diferencias finitas con 240 nodos
Simone, Nicolella, y Tognotti (2013)	Piloto 200 kW	Unidimensional con 13 EDPs	Discretización por diferencias finitas con 460 nodos
Janajreh y Al Shrah (2013)	Piloto 20 kW	Bidimensional con 8 EDP	Algoritmo SIMPLE con 53,155 celdas rectangulares
Masmoudi, Sahraoui, Grioui, y Halouani (2014b)	Piloto	Bidimensional con 11 EDPs para zona de reducción	Algoritmo SIMPLE con 4,000 y 21,000 volúmenes de control
Biagini, Barontini, y Tognotti (2016)	Piloto 200 kW	Bi-equilibrio	Resolvedor algebraico
Masmoudi, Halouani, y Sahraoui (2017)	Piloto	Bidimensional con 11 EDPs para reducción y oxidación	Algoritmo SIMPLE, con una malla de 2mm
Rodriguez-Alejandro et al. (2018)	Piloto	Bidimensional con número no especificado de EDPs	CFD Ansys-Fluent
Prasertcharoensuk et al. (2018)	Piloto	Bidimensional con 7 EDPs	CFD Ansys-Fluent
Yan et al. (2018)	Piloto 10 kW	Equilibrio térmico con 6 EAs y modelo tridimensional con 11 EDPs	Resolvedor algebraico y CFD Ansys-Fluent
Li, Shen, Wu, Dai, y Wang (2019)	Piloto 20 kW	Equilibrio térmico con 6 EAs	Newton Rhapsod

De la revisión realizada en la literatura, se encontró que no existen estudios sobre las características de los fenómenos no lineales globales del proceso y sus implicaciones en él. Para gasificadores estratificados se tiene el trabajo reciente de Badillo-Hernandez et al. (2019), donde se determina que un gasificador de escala piloto posee 3 EEs, sin evidencia de ciclos límite.

En el estudio de gasificadores Imbert, los problemas abiertos que se abordan en este trabajo son:

- La inclusión, en el modelo computacional del gasificador, de los fenómenos de transferencia de energía con el ambiente y del precalentamiento de aire.
- El análisis de la dinámica no lineal global, en particular la multiplicidad de EEs, bifurcación por cambio en parámetros y comportamiento transitorio.

La solución de los problemas anteriores es la base para:

- Evaluar la interconexión del gasificador con otros elementos del sistema, desde una perspectiva dinámica no lineal global.
- Identificar en línea parámetros que determinan el régimen de los flujos del reactor.
- Evaluar y diseñar estrategias de arranque y paro del proceso.
- Analizar las condiciones de operación óptimas.
- Diseñar controladores y estimadores de estado basados en modelo.

1.2. Planteamiento del problema

El problema a resolver en esta tesis consiste en estudiar la dinámica no lineal global de un gasificador en configuración Imbert con una etapa de precalentamiento de aire integrada, considerando márgenes nominales de operación. El problema de estudio se aborda desde modelos que deben:

- Considerar todos los fenómenos de transporte de masa y energía presentes en el proceso.
- Reproducir los datos experimentales de operación nominal.
- Describir las características no lineales del proceso.

Los objetivos específicos y la metodología que delinean el desarrollo del trabajo se enuncian a continuación.

1.2.1. Objetivos específicos

- Reproducir la operación nominal del gasificador en régimen estacionario.
- Determinar los conjuntos límite (multiplicidad de estados estacionarios y ciclos límite) para condiciones nominales de operación.
- Caracterizar la dependencia entre el contenido de humedad y flujo de aire suministrado con los conjuntos límite del reactor.
- Evaluar la robustez del estado estacionario de interés ante perturbaciones tipo pulso en el flujo de aire.
- Estudiar el arranque del gasificador bajo distintas condiciones iniciales.

1.2.2. Metodología

Combinando de manera adecuada las nociones, conceptos y herramientas de ingeniería de reactores químicos, el modelado eficiente de sistemas espacialmente distribuidos, el análisis de dinámica no lineal de reactores tubulares, el modelado de gasificadores, la teoría de fenómenos de transporte, el diseño de intercambiadores de energía y el análisis de bifurcación, se seguirá la siguiente metodología:

1. Complementar el modelo en EDP del gasificador (Yucel y Hastaoglu, 2016; Di Blasi y Branca, 2013) añadiendo las ecuaciones que describen la dinámica del precalentador de aire.
2. Ajustar los parámetros de transporte y cinética química, así como del intercambiador de calor, para reproducir los datos experimentales disponibles.

3. Aplicar la metodología de modelado eficiente de Badillo-Hernandez et al. (2019) (probada en un reactor estratificado) en un gasificador Imbert, para estudiar la dinámica no lineal global de esta configuración.
4. Realizar análisis de bifurcación con respecto al contenido de humedad en la biomasa y al flujo de aire suministrado.
5. Investigar la respuesta transitoria (tiempos de asentamiento, sobrepasos, EE alcanzado) ante perturbaciones tipo pulso en el flujo de aire para contenidos de humedad representativos y al arranque.

1.3. Contribuciones de la tesis

El estudio del gasificador Imbert con precalentamiento de aire desde una perspectiva no lineal global, permite extender las aportaciones realizadas por otros autores en el estudio del punto nominal de operación (Tabla 1.1) con las siguientes contribuciones:

1. Por primera vez se estudia la dinámica no lineal global de un gasificador Imbert con precalentamiento de aire, modelando la interconexión entre el reactor (Yucel y Hastaoglu, 2016; Janajreh y Al Shrah, 2013) y el intercambiador de calor que precalienta el aire entrante.
2. Se encuentran los conjuntos límite para el gasificador Imbert, hallando que posee multiplicidad de estados estacionarios con ausencia de ciclos límite dentro de los rangos de búsqueda utilizados, exhibiendo mono, bi o triestabilidad en función del contenido de humedad en la biomasa y/o el flujo de aire suministrado. Los resultados son consistentes con lo reportado por Badillo-Hernandez et al. (2019) para un gasificador estratificado de escala piloto, que es biestable sin ciclos límite.
3. Se reporta la existencia de un estado estacionario estable con rendimiento energético menor al nominal, en el cual es razonable y factible operar bajo condiciones de operación nominales. Este estado estacionario, llamado *de rejilla*, había sido reportado en estudios de reactores estratificados (Di Blasi, 2000) e Imbert (Simone et al., 2013), bajo condiciones extremas y no deseables en los flujos de alimentación mediante simulaciones (sin nociones de multiplicidad de EEs). Este trabajo formaliza los reportes previos mediante análisis de bifurcación respecto a contenido de humedad en la biomasa y flujo de aire suministrado.
4. Se estudia la robustez del estado estacionario nominal ante perturbaciones tipo pulso decreciente en el flujo de aire suministrado, encontrando que existen combinaciones de amplitud y duración de pulso que pueden provocar que: (I) se restablezca el estado estacionario nominal, (II) el gasificador se apague, o (III) se alcance el estado estacionario de rejilla. Los resultados obtenidos proporcionan una estrategia para alcanzar experimentalmente el estado estacionario de rejilla.
5. Se explora el arranque del gasificador, reconociendo que la condición inicial del perfil de temperatura es clave para que las trayectorias alcancen a los estados estacionarios nominal o de rejilla, y se evite al de extinción.

1.4. Organización de la tesis

- En el Capítulo 2 se describe el proceso de gasificación de biomasa, con énfasis en gasificadores con precalentamiento de aire. Se reportan las ecuaciones de conservación de masa y energía del gasificador, de igual forma se desarrollan los balances de energía para modelar el precalentador de aire. Posteriormente se aplican suposiciones estándar de modelado (de reactores e intercambiadores de calor) para obtener una versión de orden reducido del modelo en EDP. Finalmente se compara el modelo obtenido con lo reportada en la literatura, mostrando que la representación propuesta es adecuada para realizar el estudio de la dinámica no lineal del gasificador. Éste Capítulo se puede revisar rápidamente para enfocarse en el análisis de la dinámica no lineal presentado en los Capítulos siguientes.
- En el Capítulo 3 se plantea de forma general el conjunto de ecuaciones diferenciales que describen al gasificador con precalentamiento de aire (en dimensión infinita y finita), a partir de las cuales se formula de manera técnica el problema. Posteriormente, se presentan las ideas básicas de la metodología de modelado eficiente propuesta por Badillo-Hernandez et al. (2019) como la herramienta utilizada para estudiar la dinámica no lineal. Finalmente, se muestran las características específicas del reactor de gasificación bajo estudio.
- En el Capítulo 4 se muestran los resultados de simulación en estado estacionario (EE) para:
 - Reproducir la operación nominal mediante un modelo de orden $N_{exp} = 21$, comparando contra datos experimentales.
 - Describir la multiplicidad de EEs para la operación nominal del gasificador (triestabilidad) con un modelo de orden eficiente $N_S = 61$.

Finalmente, se demuestra la naturaleza de los EEs encontrados, mediante simulaciones con condiciones iniciales en la vecindad de los EEs inestables.

- En el Capítulo 5 se realiza el análisis de bifurcación respecto a contenido de humedad en la biomasa y flujo de aire suministrado, dentro de rangos de valores normales de estas variables, con lo cual se caracterizan los distintos tipos de multiplicidad en la operación del gasificador (mono, bi o triestable).
- En el Capítulo 6 se evalúa el comportamiento transitorio del gasificador y se obtiene un modelo de orden eficiente $N_t = 70$ que es utilizado para realizar el análisis correspondiente. Posteriormente, se evalúa la robustez de los EEs nominal y de rejilla ante perturbaciones tipo pulso en el flujo de aire, y se encontraron los valores de la amplitud y duración del pulso, en conjunto con el contenido de humedad en la biomasa, para los cuales se puede permanecer en el EE de análisis o transitar a otro. Finalmente, se presentan resultados de simulación para el arranque del reactor bajo distintas condiciones iniciales del perfil de temperatura.
- En el Capítulo 7 se presentan las conclusiones obtenidas a partir del desarrollo expuesto a lo largo del trabajo.

1.5. Lista de publicaciones

Congresos:

- Ulises Badillo-Hernández, **Luis Santamaría-Padilla**, Jesús Álvarez y Luis Álvarez-Icaza, “Input-state estimation of a spatially distributed tubular gasification reactor”, IFAC-PapersOnLine, Volume 52, Issue 2, 2019, Pages 212-217, ISSN 2405-8963, <https://doi.org/10.1016/j.ifacol.2019.08.038>.
- **Luis Santamaria-Padilla**, Luis Alvarez-Icaza y Jesús Alvarez. “Criterion for model order reduction of a gasification reactor”. Memorias del Congreso Latinoamericano de Control Automático 2018, 24-26 Octubre 2018, Quito, Ecuador. Galardón a mejor artículo científico.
- Ulises Badillo-Hernández, **Luis Santamaria-Padilla**, Jesús Álvarez y Luis Álvarez-Icaza, “On-line identification of the heat Peclet number in a gasification reactor”, IFAC-PapersOnLine, Volume 51, Issue 13, 2018, Pages 55-60, ISSN 2405-8963, <https://doi.org/10.1016/j.ifacol.2018.07.254>.
- **Luis Santamaria-Padilla**, Luis Alvarez-Icaza y Jesus Alvarez, 2017. “Dispersion number identification in an Imbert gasifier under parameter uncertainty”. ASME 2017 Dyn. Syst. Control Conf. DSCC 2017 3. <https://doi.org/10.1115/DSCC2017-5134>
- **Luis Santamaria-Padilla**, Ángeles Rodriguez-Cortés, Luis Alvarez-Icaza y Jesús Alvarez. “Modelado de un reactor de gasificación orientado a diseño integrado de proceso y control”. Memorias del Congreso Nacional de Control Automático 2017, 4-6 Octubre 2017, Monterrey, Nuevo León, México.

Revista:

- **Luis Santamaria-Padilla** , Ulises Badillo-Hernandez , Jesús Álvarez , Luis Álvarez-Icaza , “On the nonlinear dynamics of biomass throated tubular gasification reactors”, Computers and Chemical Engineering (2022), 163, 107828. <https://doi.org/10.1016/J.COMPCEMENG.2022.107828>

CAPÍTULO 2

MODELADO DEL GASIFICADOR CON PRECALENTAMIENTO DE AIRE

En este Capítulo se presenta el proceso de gasificación de biomasa y se identifica a los gasificadores en configuración Imbert con precalentamiento de aire como el elemento central de varios sistemas de gasificación. Se retoman los modelos de gasificadores disponibles en la literatura y se complementan con el modelado del precalentador de aire (aportación de esta tesis), obteniendo una representación completa y adecuada del sistema que permite el estudio de la dinámica no lineal de esta clase de gasificadores. Para el lector interesado en los detalles del proceso, es recomendado revisar con detalle este capítulo; mientras que los que estén interesados en el análisis de la dinámica no lineal del gasificador, pueden dar un vistazo rápido a este Capítulo y pasar directamente al Capítulo 2.

2.1. Gasificación de biomasa

Se considera como biomasa a los residuos derivados de plantas, animales o microorganismos, provenientes de la industria agropecuaria o de residuos municipales (Bhavanam, Sastry, et al., 2011). Dependiendo del tipo de biomasa, su composición cambia, teniendo como principales elementos al carbono, hidrógeno, oxígeno, nitrógeno y otros elementos inorgánicos, de igual forma su contenido de humedad es variable y normalmente alto. Mediante el *análisis elemental* se determina la composición de la biomasa, con lo cual se puede estimar su poder calórico y evaluar su uso como combustible; con el *análisis aproximado* se cuantifica el contenido de materia volátil, carbón fijo y cenizas, con esta información se estudia la combustión de la biomasa (Saidur, Abdelaziz, Demirbas, Hossain, y Mekhilef, 2011).

El proceso de gasificación requiere contar con las unidades mostradas en la Figura 2.1, que consisten en (T. Reed y Das, 1988):

- Pre-tratamiento (de biomasa), es donde se cuida que las partículas posean dimensiones similares y/o se retira parte del contenido de humedad.
- Reactor de gasificación, o simplemente *gasificador*, es donde se lleva a cabo la transformación termoquímica de la biomasa utilizando un agente gasificante (aire, oxígeno, vapor de agua, etc.), obteniendo como productos biomasa carbonizada

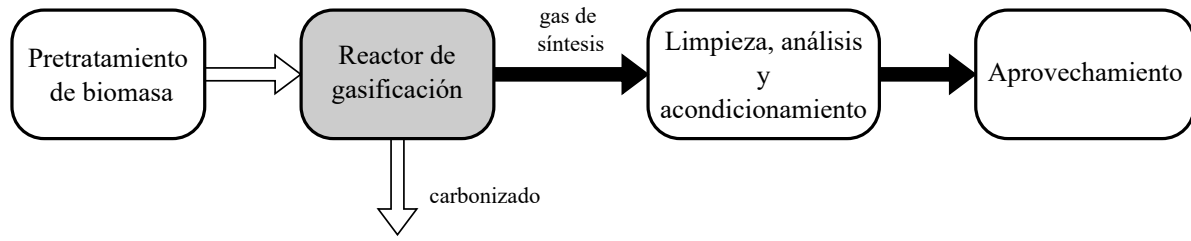


Figura 2.1: Unidades requeridas para llevar a cabo el proceso de gasificación

y gas de síntesis.

- Limpieza, es donde se retiran las partículas sólidas y alquitranes del gas de síntesis.
- Análisis, es donde se monitorea la composición del gas de síntesis y se decide si es posible utilizarlo.
- Acondicionamiento, es donde se disminuye la temperatura del gas de síntesis y/o se filtra nuevamente (si es necesario).
- Aprovechamiento, es donde se utiliza el gas de síntesis para generar energía térmica (con un quemador) y/o electromecánica (motor de combustión interna con un generador acoplado).

2.1.1. Reactor de gasificación

De las unidades descritas previamente, el gasificador es la más importante debido a que su adecuado funcionamiento determina la producción de gas de síntesis y carbonizado a partir de la biomasa suministrada. Los gasificadores son reactores tubulares, en los cuales se lleva a cabo la transformación termoquímica de la biomasa mediante los siguientes subprocesos (Basu, 2010):

- *Secado*, se transforma el contenido de humedad en la biomasa a vapor de agua (H_2O), utilizando la energía proveniente de otros subprocesos.
- *Pirólisis*, es la descomposición térmica (a más de $350^\circ C$) de la biomasa, en ausencia de agentes oxidantes, en productos gaseosos (CO , H_2 , CH_4 , H_2O), líquidos (alquitranes, aceites, nafta) y sólidos (biomasa carbonizada, cenizas).
- *Oxidación o combustión*, ocurre una oxidación parcial de la materia volátil y el carbonizado (reacciones exotérmicas con picos de temperatura de $1100 - 1500^\circ C$), obteniendo como producto CO , CO_2 y H_2O .
- *Reducción o gasificación*, donde el carbonizado, los alquitranes e hidrocarburos son reducidos con CO_2 y H_2O (reacciones endotérmicas), para obtener como producto el gas de síntesis (compuesto principalmente de H_2 , CO y CH_4) y biomasa carbonizada.

Para reactores de flujos concurrentes (que van en la misma dirección) existen dos configuraciones:

- *Estratificado*, posee una sección transversal constante y el aire es suministrado junto con la biomasa en la cima del reactor.
- *Imbert*, presenta un cambio en la geometría interna (estrangulamiento), mientras que aire y biomasa se suministran por separado.

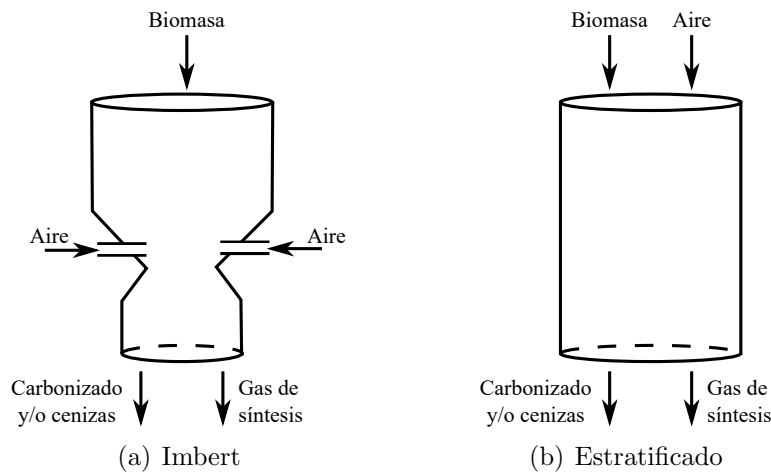


Figura 2.2: Tipos de reactores con flujos concurrentes: (a) Imbert, y (b) estratificado

En la Figura 2.2 se pueden observar las diferencias descritas. La configuración Imbert forma parte de una buena cantidad de sistemas de gasificación en escala laboratorio, piloto e industrial (Sansaniwal et al., 2017), teniendo variantes que pueden incluir unidades de precalentamiento acopladas al reactor.

2.1.2. Sistema de gasificación

Los sistemas de gasificación fabricados por All Power Labs tienen una capacidad de producción de energía eléctrica de 10 a 100 kW, la versión más completa está conformada por los elementos mostrados en la Figura 2.3, los cuales son:

- Tolva, es donde se almacena la biomasa.
- Cubeta de secado, es un intercambiador de calor que utiliza el gas de síntesis que sale del reactor de gasificación (después de pasar por el ciclón) para precalentar la biomasa y evaporar parte de su contenido de humedad.
- Piroreactor, es un intercambiador de calor que aprovecha la energía térmica contenida en los gases de escape de un motor de combustión interna para incrementar la temperatura de la biomasa y favorecer la pirólisis.
- Reactor de oxidación/reducción (gasificador), es donde se llevan a cabo las reacciones de oxidación y reducción para obtener como productos carbonizado y gas de síntesis caliente, de este último se aprovecha su energía térmica para precalentar (en una cámara anular alrededor del reactor) el flujo de aire entrante mediante 5 boquillas.
- Ciclón, es un elemento que separa las partículas sólidas que puede contener el gas de síntesis que sale del reactor.
- Filtro, es donde se limpia el gas de síntesis, retirando principalmente los alquitranes que llegue a contener.
- Ventiladores, se utilizan para poner en marcha al sistema de gasificación en el arranque y conducen el flujo de gas de síntesis hacia el quemador.
- Quemador, es donde el gas de síntesis se aprovecha cuando no se utiliza en el motor de combustión interna.
- Motor de combustión interna (MCI), es el elemento que utiliza como combustible al gas de síntesis producto del proceso y está acoplado a un generador eléctrico, sus gases de escape son aprovechados en el piroreactor.

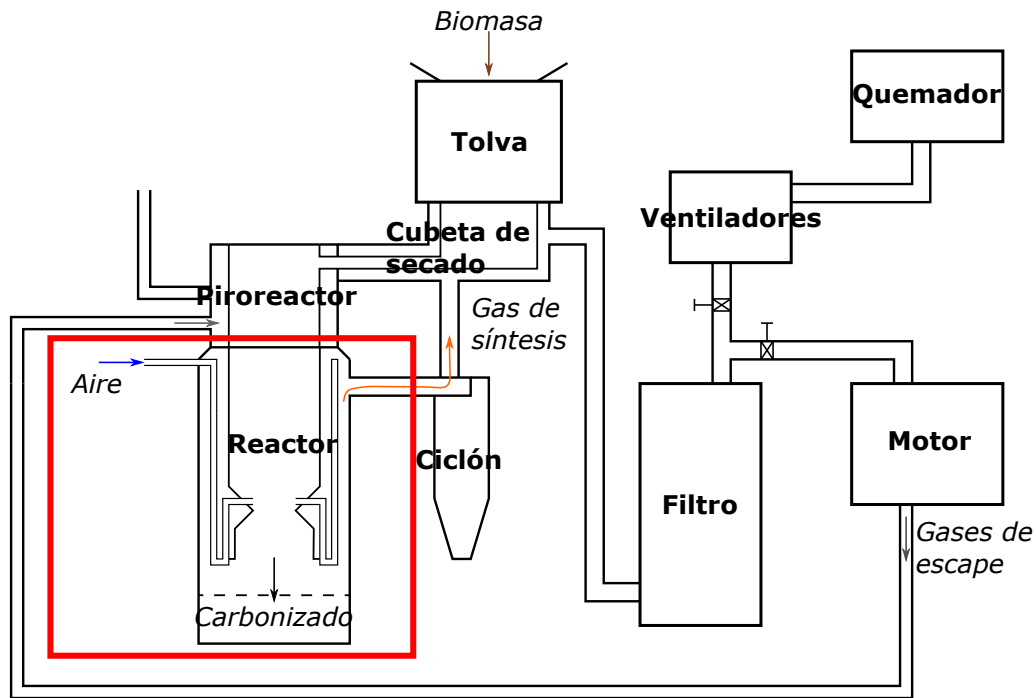


Figura 2.3: Diagrama de componentes en sistema de gasificación de All Power Labs

Existen versiones del sistema de gasificación que poseen variaciones en los elementos que los componen, en la Tabla 2.1 se muestra una breve comparación, es posible observar que la cubeta de secado, el pirorreactor o el motor de combustión interna, pueden no estar presentes, mientras que el reactor con precalentamiento de aire se encuentra siempre presente (recuadro rojo en Figura 2.3). En la Figura 2.4 se presenta el diagrama del gasificador Imbert presente en los sistemas de gasificación de la Tabla 2.1, el cual es un reactor tubular compuesto por cuatro elementos principales:

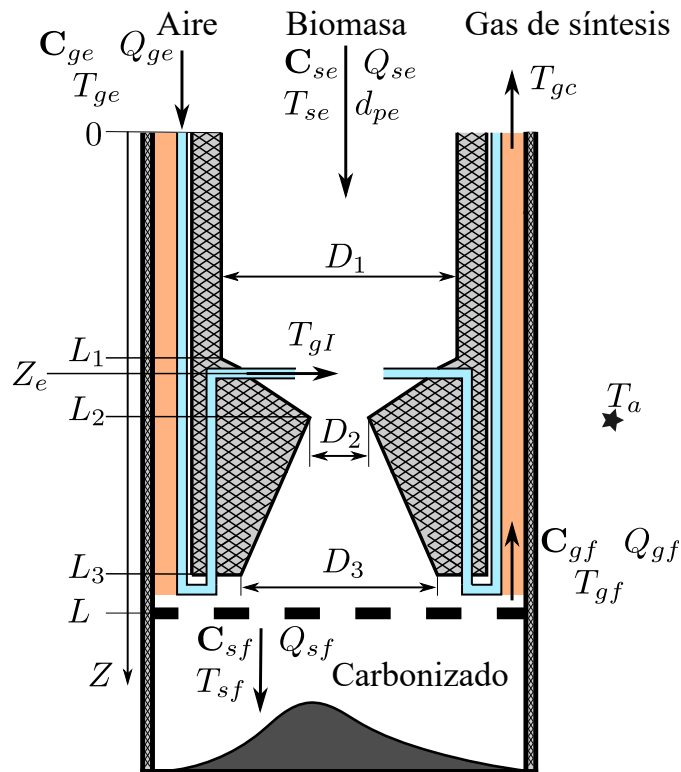
1. Una cámara interna de reacción con geometría no uniforme, donde se llevan a cabo los subprocesos de secado, pirólisis, oxidación y reducción de la biomasa suministrada.
2. Una pared interna, compuesta por dos láminas de acero inoxidable con perlita entre ellas, que separa a la cámara de reacción de la sección anular.
3. La sección anular es donde se lleva a cabo el precalentamiento del aire entrante, ya que las tuberías que conducen el aire están expuestas al flujo en contracorriente del gas de síntesis producto del proceso.
4. Una pared externa, compuesta por dos láminas de acero inoxidable con una capa de fibra de vidrio entre ellas, cuya función es reducir las pérdidas térmicas del intercambiador de calor con el ambiente.

Analizando la Tabla 2.1, es posible observar que el gasificador Imbert con precalentamiento ha sido objeto de estudio de diversos trabajos, sin embargo ninguno de ellos ha modelado y/o evaluado el precalentamiento de aire inherente en este reactor. Los trabajos basados en resultados experimentales (Shen et al., 2019; Nisamaneenate et al., 2015; Maneerung et al., 2018) mencionan que el precalentamiento de aire es benéfico en términos energéticos, sin embargo no se reporta la efectividad del intercambiador de calor, la cual es una medida estándar en la literatura de transferencia de calor (Kakaç, Liu, y Pramuanjaroenkij, 2012).

Tabla 2.1: Trabajos con sistemas de gasificación de All Power Labs

Trabajo	CS		PR		PA		MCI	
	Ins.	Mod.	Ins.	Mod.	Ins.	Mod.	Ins.	Mod.
Shen et al. (2019) (Exp.)	✓		✓		✓		✗	
Yucel y Hastaoglu (2016) (Sim.)	✗	–	✗	–	✓	✗	✗	–
Janajreh y Al Shrah (2013) (Sim.)	✗	–	✗	–	✓	✗	✗	–
Rodriguez-Alejandro et al. (2018) (Sim.)	✗	–	✗	–	✓	✗	✗	–
Li et al. (2019) (Sim.)	✓	✓	✓	✓	✓	✗	✓	✓
Nisamaneenate et al. (2015) (Exp.)	✓		✓		✓		✗	
Maneerung et al. (2018) (Exp.)	✓		✓		✓		✓	

CS: Cubeta de secado, PR: Piroreactor, PA: Pre calentamiento de aire, MCI: Motor de combustión interna. Ins: ¿Está instalado?, Mod: ¿Es modelado?

**Figura 2.4:** Gasificador Imbert con precalentamiento de aire

De los trabajos que utilizan modelos computacionales, Yucel y Hastaoglu (2016) simula al reactor a partir de una representación por diferencias finitas, mientras que Janajreh y Al Shrah (2013) lo hace mediante CFD, dichas representaciones implican una gran cantidad de EDO a resolver simultáneamente; el trabajo de Li et al. (2019) parte de modelos de equilibrio térmico, lo cual reduce al reactor a una sola unidad y sólo brinda información a la salida del sistema.

En términos de modelado del precalentamiento de aire:

- Yucel y Hastaoglu (2016) incluyó en su análisis sólo la temperatura del gas de síntesis

en el intercambiador de calor, pero omite su interacción con el aire entrante.

- Li et al. (2019) se concentra en cuantificar las pérdidas energéticas hacia el ambiente omitiendo la transferencia de energía hacia el aire.
- Janajreh y Al Shrah (2013) omite completamente su modelado.

De lo anterior se desprende que los modelos del gasificador Imbert con precalentamiento de aire actualmente disponibles:

- No son adecuados para efectos de análisis de dinámica no lineal.
- No contemplan al intercambiador de calor presente en el reactor.

De la teoría de análisis y diseño de procesos químicos (Morud y Skogestad, 1998; Baldea y Daoutidis, 2012; Bildea, Dimian, y Iedema, 2001) se sabe que el acoplamiento de unidades modifica de manera importante las características de la dinámica no lineal (estabilidad, tiempo de respuesta, así como robustez ante perturbaciones), lo cual hace necesario trabajar con un modelo que permita realizar una evaluación apropiada del gasificador con la etapa de precalentamiento de aire.

2.2. Modelo de gasificador con intercambiador de calor integrado

En esta sección, se presentan las ecuaciones diferenciales parciales que han sido utilizadas en la literatura de gasificación para representar al gasificador, las cuales son complementadas con la adición del modelo del intercambiador de calor que precalienta el aire.

2.2.1. Ecuaciones constitutivas de reactor

Se consideran las EDPs unidimensionales que han sido ampliamente utilizadas por diversos autores para describir el proceso de gasificación dentro del reactor (Di Blasi, 2000; Di Blasi y Branca, 2013), las cuales consisten en balances de masa, energía y continuidad de sólidos y gases:

- Contenido de humedad en biomasa

$$(1 - \varepsilon) \frac{\partial C_M}{\partial t} + (1 - \varepsilon) \frac{\partial u_s C_M}{\partial Z} = -R_1 \quad (2.1a)$$

- Biomasa

$$(1 - \varepsilon) \frac{\partial C_B}{\partial t} + (1 - \varepsilon) \frac{\partial u_s C_B}{\partial Z} = -R_2 \quad (2.1b)$$

- Carbonizado

$$(1 - \varepsilon) \frac{\partial C_C}{\partial t} + (1 - \varepsilon) \frac{\partial u_s C_C}{\partial Z} = s_{C,2} R_2 - (R_9 + R_{10} + R_{11} + R_{12}) \quad (2.1c)$$

- Continuidad en fase sólida

$$C_C \frac{\partial u_s}{\partial t} = - \sum_j R_j, \quad j = 9 - 12 \quad (2.1d)$$

- Especies en fase gas

$$\varepsilon \frac{\partial C_i}{\partial t} + \frac{\partial u_g C_i}{\partial Z} = M_i \sum_j s_{i,j} R_j + s_{i,2} R_2 + s_{i,3} R_3 + \rho_{ie} u_{ge} \delta(Z - Z_e) \quad (2.1e)$$

$$i = O_2, H_2, CO, CO_2, CH_4 \quad j = 4 - 8, 10 - 12$$

- Vapor de agua

$$\varepsilon \frac{\partial C_{H_2O}}{\partial t} + \frac{\partial C_{H_2O} u_g}{\partial Z} = M_{H_2O} \sum_j s_{H_2O,j} R_j + s_{H_2O,2} R_2 \quad (2.1f)$$

$$j = 4 - 8, 10 - 12$$

- Alquitraneos (T) en fase gas

$$\varepsilon \frac{\partial C_T}{\partial t} + \frac{\partial C_T u_g}{\partial Z} = s_{T,2} R_2 - R_3 \quad (2.1g)$$

- Continuidad en fase gaseosa

$$\varepsilon \frac{\partial \rho_g}{\partial t} + \frac{\partial u_g \rho_g}{\partial Z} = M_i \sum_i \sum_j s_{i,j} R_j + R_1 + (1 - s_{C,2}) R_2 + \rho_{ge} u_{ge} \delta(Z - Z_e) \quad (2.1h)$$

$$i = O_2, H_2, CO, CO_2, CH_4, H_2O \quad j = 9 - 12$$

- Energía en fase sólida

$$(1 - \varepsilon) \frac{\partial (\sum_i \rho_i H_{s,i})}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial Z} \left(K_s \frac{\partial T_s}{\partial Z} \right) + \frac{\partial (u_s \sum_i \rho_i H_{s,i})}{\partial Z} - \sum_j R_j \Delta H_j$$

$$- Q_{sg}(T_s, T_g) + Q_{sw}(T_s, T_{wi}) \quad (2.1i)$$

$$H_{s,i} = c_{psi}(T_s - T_0), \quad i = B, C, \quad j = 2, 9 - 12$$

- Energía en fase gas

$$\varepsilon \frac{\partial (\sum_i \rho_i H_{g,i})}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial Z} \left(K_g \frac{\partial T_g}{\partial Z} \right) + \frac{\partial (u_g \sum_i \rho_i H_{g,i})}{\partial Z} - \sum_j R_j \Delta H_j + Q_{sg}(T_s, T_g)$$

$$+ Q_{gw}(T_g, T_{wi}) + u_{ge} \rho_{ge} c_{pge}(T_{gI} - T_0) \delta(Z - Z_e) \quad (2.1j)$$

$$H_{g,i} = c_{pgi}(T_g - T_0), \quad i = N_2, O_2, H_2, CO, CO_2, CH_4, H_2O, T, \quad j = 3 - 8$$

donde C_j es la concentración molar de la j -ésima especie sólida (B -biomasa, M -humedad, C -carbonizado) o gaseosa (O_2 , CO , CO_2 , H_2 , CH_4 , H_2O , T), T_s (o T_g) es la temperatura de la fase sólida (o gas), ε es la porosidad del lecho, t es la variable temporal, Z es la variable espacial, R_i es la velocidad de reacción de la i -ésima reacción (Tabla A.1), $s_{i,j}$ el coeficiente estequiométrico de la i -ésima componente asociado a la j -ésima reacción, u_s (o u_g) es la velocidad del sólido (o gas), M_i es el peso molecular de la i -ésima componente, ρ_s (o ρ_g) es la densidad de sólido (o gas), ρ_{ie} es la densidad de la i -ésima componente del aire de entrada, u_{ge} es la velocidad del aire entrante, ρ_{ge} es la densidad del aire entrante, $\delta(Z - Z_e)$ es una función impulso unitario que determina en que posición del reactor entra el aire, Q_{sg} es la velocidad de transferencia de energía entre las fases sólido y gas, Q_{sw} (o Q_{gw}) es la velocidad de transferencia de energía entre la fase sólida (o gas) con la pared del gasificador, T_0 es una temperatura de referencia, T_{gI} es la temperatura a la que entra el aire, K_s (o K_g) es la conductividad térmica efectiva de sólido (o gas).

2.2.2. Ecuaciones del precalentador de aire

En la Figura 2.5 se presenta un corte lateral del gasificador, se observa que posee:

- Una pared interna (en color gris) compuesta de dos placas de acero inoxidable con perlita como aislante entre ellas.
- Una pared externa (en color amarillo) con dos placas de acero inoxidable con fibra de vidrio como aislante entre ellas.

Tabla 2.2: Reacciones químicas y velocidades de reacción.

1. Evaporación de humedad.
$\underbrace{[H_2O]_l}_M \xrightarrow{k_1} [H_2O]_g$
2. Pirólisis primaria.
$\underbrace{C_a H_b O_d}_B \xrightarrow{k_2} s_{C,2}C + s_{CO,2}CO + s_{CO_2,2}CO_2 + s_{H_2,2}H_2 + s_{CH_4,2}CH_4 + s_{H_2O,2}H_2O + s_{T,2}T$
3. Pirólisis secundaria.
$\underbrace{CH_{1.522}O_{0.027}}_T \xrightarrow{k_3} s_{CO,3}CO + s_{CO_2,3}CO_2 + s_{CH_4,3}CH_4$
4. Oxidación de alquitrán.
$T + 0.867O_2 \xrightarrow{k_4} CO + 0.761H_2O$
5. Oxidación de metano.
$CH_4 + 1.5O_2 \xrightarrow{k_5} CO + 2H_2O$
6. Oxidación de monóxido de carbono.
$2CO + O_2 \xrightarrow{k_6} 2CO_2$
7. Oxidación de hidrógeno.
$2H_2 + O_2 \xrightarrow{k_7} 2H_2O$
8. Desplazamiento del gas de agua.
$CO + H_2O \xleftrightarrow{k_8} CO_2 + H_2$
9. Oxidación de carbonizado.
$\underbrace{CH_\alpha O_\beta}_c + \gamma O_2 \xrightarrow{k_9^e} (2 - 2\gamma - \beta + \frac{\alpha}{2}) CO + (\frac{\alpha}{2}) H_2O + (2\gamma + \beta - \frac{\alpha}{2} - 1) CO_2$
10. Reducción de carbonizado por medio de dióxido de carbono.
$C + CO_2 \xrightarrow{k_{10}^e} 2CO + \beta H_2O + (\frac{\alpha}{2} - \beta) H_2$
11. Reducción de carbonizado por medio de hidrógeno.
$C + (2 - \frac{\alpha}{2} + \beta) H_2 \xrightarrow{k_{11}^e} CH_4 + \beta H_2O$
12. Reducción de carbonizado por medio de vapor de agua.
$C + (1 - \beta) H_2O \xrightarrow{k_{12}^e} CO + (1 - \beta + \frac{\alpha}{2}) H_2$

- Una sección anular con tuberías de acero inoxidable que conducen el aire (en color azul) para ser precalentado por el gas de síntesis (en color naranja) que se produce dentro del reactor.

Siguiendo las definiciones básicas en el modelado de intercambiadores de calor (Kakaç et al., 2012; Bergman, Lavine, Incropera, y Dewitt, 2011) se obtuvieron los siguientes balances de energía y masa para las paredes (interna y externa), gas caliente (gas de síntesis) y gas frío (aire entrante):

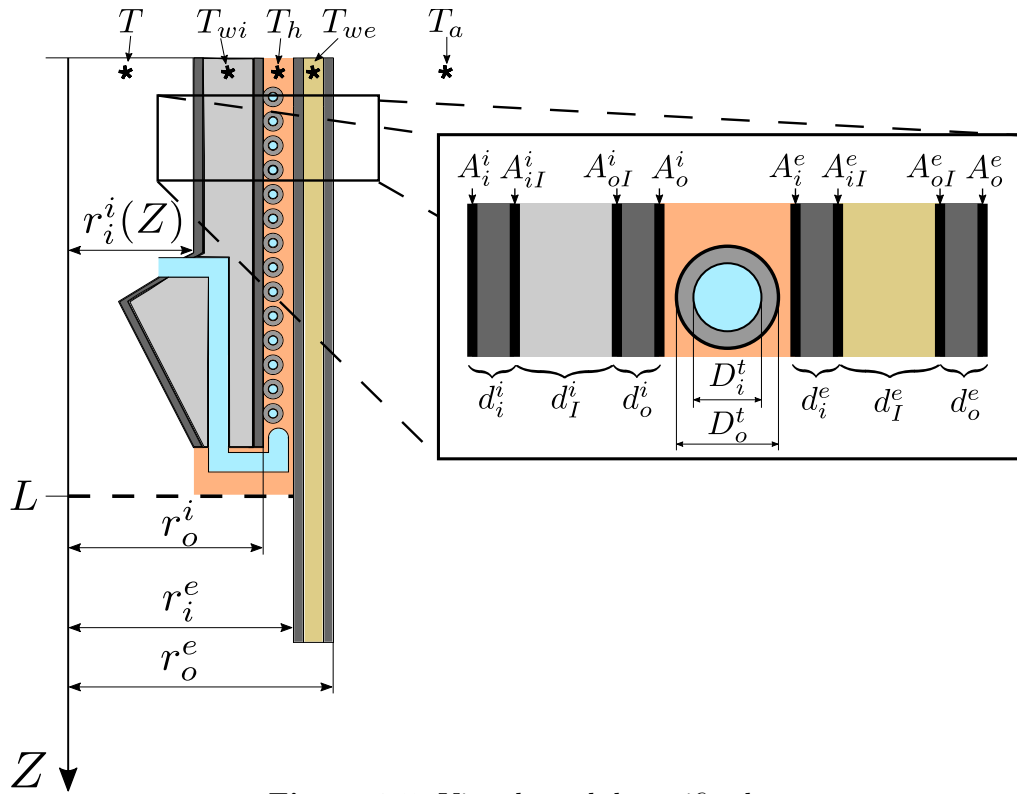


Figura 2.5: Vista lateral de gasificador

- Balance de energía en pared interna

$$\frac{\partial}{\partial t} [H_{wi}T_{wi}] = -h_{bwi}(T_{wi} - T) - h_{bc}(T_{wi} - T_a) - h_{bg}(T_{wi} - T_h) - h_{wiwe}(T_{we} - T_{wi}) \quad (2.2a)$$

$$H_{wi}(Z) = V_i^i(Z)\rho_i^i c_{pi}^i + \varepsilon_I^i V_I^i(Z)\rho_I^i c_{pI}^i + (1 - \varepsilon_I^i)V_I^i(Z)\rho_a c_{pa} + V_o^i(Z)\rho_o^i c_{po}^i + M_T(Z)c_{pt}$$

- Balance de energía en pared externa

$$\frac{\partial}{\partial t} [H_{we}T_{we}] = -h_{wiwe}(T_{we} - T_{wi}) - h_{gwe}(T_{we} - T_g) - h_{wa}(T_{we} - T_a) \quad (2.2b)$$

$$H_{we}(Z) = V_i^e(Z)\rho_i^e c_{pi}^e + V_I^e(Z)\rho_I^e c_{pI}^e + V_o^e(Z)\rho_o^e c_{po}^e$$

- Balance de energía del gas de síntesis en sección anular

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} [V_h \rho_h(T_h) c_{ph} T_h] &= - \frac{\partial}{\partial Z} [v_h(T_h) \rho_h(T_h) c_{ph} T_h] - h_{cg}(T_h - T_c) \\ &\quad - h_{bg}(T_h - T_{wi}) - h_{gwe}(T_h - T_{we}) \end{aligned}$$

- Balance de masa del gas de síntesis en sección anular

$$\frac{\partial}{\partial t} [V_h \rho_h(T_h)] = \frac{\partial}{\partial Z} [v_h(T_h) \rho_h(T_h)] \quad (2.2c)$$

sustituyendo el balance de masa del gas de síntesis en la sección anular en su balance de energía se obtiene

$$\begin{aligned} V_h \rho_h(T_h) c_{ph} \frac{\partial T_h}{\partial t} &= - v_h(T_h) \rho_h(T_h) c_{ph} \frac{\partial T_h}{\partial Z} - h_{cg}(T_h - T_c) \\ &\quad - h_{bg}(T_h - T_{wi}) - h_{gwe}(T_h - T_{we}) \end{aligned} \quad (2.2d)$$

- Balance de energía del aire en las tuberías

$$\frac{\partial}{\partial t} [V_c \rho_c(T_c) c_{pc} T_c] = - \frac{\partial}{\partial Z} [v_c(T_c) \rho_c(T_c) c_{pc} T_c] - h_{bc}(T_c - T_{wi}) - h_{cg}(T_c - T_h)$$

- Balance de masa del aire en las tuberías

$$\frac{\partial}{\partial t} [V_c \rho_c(T_c)] = \frac{\partial}{\partial Z} [v_c(T_c) \rho_c(T_c)] \quad (2.2e)$$

sustituyendo el balance de masa del aire en las tuberías en su balance de energía se obtiene

$$V_c \rho_c(T_c) c_{pc} \frac{\partial T_c}{\partial t} = - v_c(T_c) \rho_c(T_c) c_{pc} \frac{\partial T_c}{\partial Z} - h_{bc}(T_c - T_{wi}) - h_{cg}(T_c - T_h) \quad (2.2f)$$

Con condiciones iniciales ($0 \leq Z \leq L$)

$$T_{wi}(t_0, Z) = T_{wi0}(Z), \quad T_{we}(t_0, Z) = T_{we0}(Z), \quad \text{para } t = t_0$$

y de frontera ($t > t_0$)

$$\begin{aligned} \rho_c(T_c) Q_c(T_c) &= \rho_{ce}(T_{ce}) Q_{ce}(T_{ce}) \quad \text{para } Z = 0 \\ T_c &= T_{ce} \quad \text{at } Z = 0 \\ \rho_h(T_h) Q_h(T_h) &= \rho_{he}(T_{he}) Q_{he}(T_{he}) \quad \text{at } Z = L \\ T_h &= T_{he} \quad \text{at } Z = L \end{aligned}$$

donde T_{wi} (o T_{we}) es la temperatura de la pared interna (o externa), T_c (o T_h) es la temperatura del aire en las tuberías (o del gas de síntesis en la sección anular), T es la temperatura del lecho sólido-gas dentro del reactor, ρ_h (o ρ_c) es la densidad del gas de síntesis en la sección anular (o del aire en las tuberías), H_{wi} (o H_{we}) es la capacitancia térmica de la pared interna (o externa), $h_{(\cdot)}$ son coeficientes de transferencia global de energía, V_i^i (o V_o^i) es el volumen de interno (o externo) de la pared interna, V_i^e (o V_o^e) es el volumen de interno (o externo) de la pared externa, V_I^i es el volumen del aislante de la pared interna, ε_I^i es la porosidad del aislante en la pared interna, ρ son densidades de los materiales que componen a las paredes, c_p son los calores específicos de los materiales que componen a las paredes, T_{wi0} (o T_{we0}) es el perfil de temperatura inicial de la pared interna (o externa), ρ_{ce} (o ρ_{he}) es la densidad del aire (o gas de síntesis) que entra al intercambiador, T_{ce} (o T_{he}) es la temperatura del aire (o gas de síntesis) que entra al intercambiador, Q_{ce} (o Q_{he}) es flujo volumétrico del aire (o gas de síntesis) que entra al intercambiador.

2.2.3. Modelo resultante al aplicar suposiciones estándar

Considerando al modelo formado por las ecuaciones (2.1) y (2.2), se realizan las siguientes suposiciones estándar de reactores tubulares (Baldea y Daoutidis, 2012; Hlavacek, 1970) y gasificadores en general: (Badillo-Hernandez et al., 2019; Gøbel, Henriksen, Jensen, Qvale, y Houbak, 2007)

1. Equilibrio térmico entre fases sólido-gas.
2. Estado cuasiestacionario para la fase gas.

Realizando la manipulación algebraica correspondiente se obtiene el modelo del gasificador descrito por:

- Balances de masa

$$0 \approx -\partial_Z [\rho_g(T)Q_g/A_R(Z)] + \mathbf{m}_g^T \mathbf{R}(\mathbf{C}, T, \mathbf{Q}) + (Q_{ge}\rho_{ge}/V_{in}) \delta(Z - Z_e) \quad (2.3a)$$

$$0 \approx -\partial_Z [\mathbf{C}_g Q_g/A_R(Z)] + \mathbf{S}_g^T \mathbf{R}(\mathbf{C}, T, \mathbf{Q}) + (Q_{ge}\mathbf{C}_{ge}/V_{in}) \delta(Z - Z_e) \quad (2.3b)$$

$$0 = -\rho_{e0}\partial_Z [Q_s/A_R(Z)] - \mathbf{s}_c^T \mathbf{R}(\mathbf{C}, T, \mathbf{Q}) \quad (2.3c)$$

$$\partial_t \mathbf{C}_s = -\partial_Z [\mathbf{C}_s Q_s/A_R(Z)] + \mathbf{S}_s^T \mathbf{R}(\mathbf{C}, T, \mathbf{Q}) \quad (2.3d)$$

con condiciones de frontera, para $t \geq t_0$

$$Z = 0 : \quad \rho_g(T)Q_g = \rho_{gt}Q_{gt} \approx 0, \quad \mathbf{C}_g Q_g = \mathbf{C}_{gt}Q_{gt} \approx 0 \\ \rho_s(\mathbf{C}_s)Q_s = \rho_{se}Q_{se}, \quad \mathbf{C}_s Q_s = \mathbf{C}_{se}Q_{se}$$

con condiciones iniciales, para $0 \leq Z \leq L$

$$\mathbf{C}_s(Z, t_0) = \mathbf{C}_{so}(Z)$$

- Balances de energía

$$\partial_t [H_b(\mathbf{C}_s, Z)T] = \partial_Z [K(T)\partial_Z T] - \partial_Z [Q_h(\mathbf{C}, T, \mathbf{Q})T/A_R(Z)] - \Delta \mathbf{H}_r^T \mathbf{R}(\mathbf{C}, T, \mathbf{Q}) \\ - Q_{bw}/V_G(Z) + [Q_{ge}\rho_{ge}c_{pge}T_{gI}/V_{in}] \delta(Z - Z_{in}) \quad (2.3e)$$

con

$$T_{gI} = T_c(L, t)$$

$$Q_{bw} = h_{bg}(T_h, F_{he})(T - T_h) + h_{bc}(F_{ge})(T - T_c) + h_{bc}(F_{ge})(T_h - T_c)$$

$$Q_h = Q_g \rho_g(T) c_{pg}(\mathbf{C}_g) + Q_s \rho_s(\mathbf{C}_s) c_{ps}(\mathbf{C}_s)$$

con condiciones de frontera para $t \geq t_0$

$$Z = 0 : \quad [(\rho_{se}Q_{se}c_{pse} + \rho_{gt}Q_{gt}c_{pgt})/A_R(Z)](T - T_{se}) = K(T)\partial_Z T$$

$$Z = L : \quad h_\gamma(T - T_{gr}) = K(T)\partial_Z T(L, t)$$

con condiciones iniciales para $0 \leq Z \leq L$

$$T(Z, t_0) = T_0(Z)$$

Para el intercambiador de calor se realizan las suposiciones estándar de (Correa y Marchetti, 1987; Gutierrez R. y Cooper, 1979; Mathisen, Morari, y Skogestad, 1994):

1. Estado cuasiestacionario para la fase gas.
2. Flujo convectivo no reactivo del gas de síntesis en la sección anular.
3. La temperatura de la pared externa es la misma que la del gas de síntesis caliente ($T_{we} \approx T_h$).
4. La temperatura de la pared interna es el promedio de la temperatura del lecho y el gas de síntesis en la sección anular ($T_{wi} \approx \frac{T_h + T}{2}$).

Realizando el desarrollo algebraico correspondiente se obtiene el modelo del intercambiador de calor descrito por:

- Balances de energía en flujos de precalentador de aire

$$0 \approx -\rho_{ge}Q_{ge}c_{pge}\partial_Z T_c - h_{bc}(F_{ge})(T_c - T) \\ - h_{bc}(F_{ge})(T_c - T_h) - h_{cg}(F_{ge}, F_{he})(T_c - T_h) \quad (2.3f)$$

$$\partial_t [H_w(Z)T_h] = -F_{he}c_{phe}(V_h/A_{an})\partial_Z T_h - h_{bg}(T_h, F_{he})(T_h - T) \\ - h_{wa}(T_h, F_{he})(T_h - T_a) - h_{cg}(Q_{ge}, F_{he})(T_h - T_c) \quad (2.3g)$$

Tabla 2.3: Coeficientes de matriz estequiométrica \mathbf{S}

R_j	Sólidos			Gases						
	B	C	M	O_2	H_2	CO	CO_2	H_2O	CH_4	T
1	0	0	1	0	0	0	0	1	0	0
2	-1	0.33	0	0	0.01	0.75	0.13	0.25	0.015	0.19
3	0	0	0	0	0	0.5	0.3	0	0.2	-1
4	0	0	0	-0.867	0	1	0	0.761	0	-1
5	0	0	0	-1.5	0	1	0	2	-1	0
6	0	0	0	-1	0	-2	2	0	0	0
7	0	0	0	-1	-2	0	0	2	0	0
8	0	0	0	0	1	-1	1	-1	0	0
9	0	-1	0	$-\gamma$	0	$2 - 2\gamma - \beta + \frac{\alpha}{2}$	$2\gamma + \beta - \frac{\alpha}{2} - 1$	$\frac{\alpha}{2}$	0	0
10	0	-1	0	0	$\frac{\alpha}{2} - \beta$	2	-1	β	0	0
11	0	-1	0	0	$-(2 - \frac{\alpha}{2} - \beta)$	0	0	β	1	0
12	0	-1	0	0	$1 - \beta + \frac{\alpha}{2}$	1	0	$-(1 - \beta)$	0	0

con

$$F_{he} = [\rho_g(T)Q_g](L, t); \quad c_{phe} = \sum_{i=1}^{n_g} c_{pi}^g X_i^g(L, t), \quad X_i^g = C_i^g / C_g(T)$$

con condiciones de frontera para $t \geq t_0$

$$\begin{aligned} Z = 0 : \quad T_c &= T_{ge} \\ Z = L : \quad T_h &= T(L, t) \end{aligned}$$

donde

$$\begin{aligned} \partial_Z &= \frac{\partial}{\partial Z}, \quad \partial_t = \frac{\partial}{\partial t} \\ \mathbf{S} &= [\mathbf{S}_s \ \mathbf{S}_g] = [s_{i,j}]_{n_r \times n_c}, \quad \mathbf{C} = \begin{bmatrix} \mathbf{C}_s \\ \mathbf{C}_g \end{bmatrix}, \quad \mathbf{Q} = \begin{bmatrix} Q_s \\ Q_g \end{bmatrix} \\ \mathbf{C}_s &= [C_B \ C_M \ C_C]^T, \quad \mathbf{C}_g = [C_{O_2} \ C_{H_2} \ C_{CO} \ C_{CO_2} \ C_{H_2O} \ C_{CH_4} \ C_T]^T \\ \mathbf{R} &= [R_1 \ R_2 \ \dots \ R_{12}]^T, \quad \Delta \mathbf{H}_r = [\Delta H_1 \ \Delta H_2 \ \dots \ \Delta H_{12}]^T \end{aligned}$$

\mathbf{C}_s (o \mathbf{C}_g) es la concentración de sólidos (o gases), T es la temperatura del lecho, T_c (o T_h) es la temperatura del aire en las tuberías (o del gas de síntesis en la sección anular), Q_s (o Q_g) es el flujo volumétrico de sólidos (o gases), A_R es el área interna del reactor, \mathbf{m}_g es una matriz con los pesos molares de los gases, \mathbf{R} (o $\Delta \mathbf{H}_r$) es un vector con las velocidades (o las entalpías) de reacción, \mathbf{S}_s (o \mathbf{S}_g) es la matriz estequiométrica de sólidos (o gases) de la Tabla 2.3, \mathbf{s}_c es la columna asociada al carbonizado de la matriz estequiométrica de la Tabla 2.3, H_b (o H_w) es la capacitancia térmica del lecho (o de la pared), Q_h es el flujo convectivo de calor, Q_{bw} es el flujo de calor entre el lecho y la pared interna del intercambiador de calor, T_{gI} es la temperatura a la que entra el aire precalentado, V_G es el volumen del lecho, V_{in} es el volumen de aire entrante, $\delta(Z - Z_e)$ es una función impulso unitario que determina en que posición del reactor entra el aire, F_{ge} (o F_{he}) es el gasto másico de aire (o gas de síntesis) entrante al intercambiador de calor, h_γ (o T_{gr}) es el coeficiente de transferencia de energía (o la temperatura) de la rejilla del fondo del reactor, V_h es el volumen del gas de síntesis en sección anular, A_{an} es el área de la sección anular, h_{jk} es el producto del coeficiente de transferencia de energía por área desde j a k .

Las suposiciones 3 y 4 en el modelado del intercambiador de calor, implican que la inercia térmica de las paredes compuestas externa e interna, son consideradas en los balances

de energía del reactor (2.3e) y del gas de síntesis caliente (2.3g), mediante las capacitancias térmicas del reactor H_b (lecho y la mitad de la pared interna) y del intercambiador de energía H_w (gas de síntesis con la pared externa y la otra mitad de la pared interna), definidas como

$$H_b(\mathbf{C}_s, Z) = \frac{(1 - \varepsilon)V_b(Z)}{V_{bw}(Z)} \sum_{i=1}^{n_s} C_i^s c_{pi}^s + \frac{H_{wi}(Z)}{2V_{bw}(Z)} \text{ [kJ/(m}^3\text{K)]}$$

$$H_w = H_{we} + \frac{H_{wi}(Z)}{2} \text{ [kJ/K]}$$

con la capacitancia térmica H_{wi} del cuerpo interno considerando el lecho más la pared interna y las tuberías

$$H_{wi}(Z) = V_i^i(Z)\rho_i^i c_{pi}^i + \varepsilon_I^i V_I^i(Z)\rho_I^i c_{pI}^i + (1 - \varepsilon_I^i)V_I^i(Z)\rho_a^i c_{pa}^i + V_o^i(Z)\rho_o^i c_{po}^i + M_t(Z)c_{pt}$$

y la capacitancia térmica H_{we} del cuerpo externo considerando la pared externa

$$H_{we}(Z) = V_i^e(Z)\rho_i^e c_{pi}^e + V_I^e(Z)\rho_I^e c_{pI}^e + V_o^e(Z)\rho_o^e c_{po}^e$$

Con todo lo anterior, se obtiene el modelo (2.3) que es utilizado para el estudio, el cual considera la dinámica del gasificador y su interconexión con el precalentador de aire. Las definiciones de las funciones no reportadas en este Capítulo, se encuentran en el Apéndice A.

2.2.4. Comparación del modelo propuesto frente a la literatura

Comparando contra otros autores que estudian a este gasificador bajo el mismo enfoque de modelado (Yucel y Hastaoglu, 2016; Janajreh y Al Shrah, 2013; Yan et al., 2018), se encontró que ellos:

- Modelan la dinámica rápida de la fase gas.
- Modelan por separado las paredes, así como las fases sólido y gas.
- Consideran que el gas de síntesis caliente reacciona en el intercambiador de calor.
- Acoplan las ecuaciones (2.3a) a (2.3e) (balances de masa y energía del reactor) con la ecuación (2.3g) (balance de energía de gas de síntesis en intercambiador), pero no se modela el balance de energía del aire (2.3f), por lo que al aire que entra al reactor (T_{gI}) se le asigna un valor constante (tomado de experiencia en operación) y utilizan la ecuación (2.3g) para calcular la temperatura del gas síntesis a la salida del intercambiador de calor (T_{gc}), es decir:

$$T_{gI} = T_{exp} \tag{2.5a}$$

$$T_{gc}(t) = T_h(0, t) \tag{2.5b}$$

Las simplificaciones realizadas por los autores resultan efectivas para la descripción del proceso en el estado estacionario de interés, sin embargo no resultan adecuadas para el modelado de la dinámica no lineal del reactor, debido a que el acoplamiento entre el reactor y el intercambiador de energía no se describe apropiadamente.

El modelo propuesto en esta tesis resulta adecuado para realizar el análisis formal de la dinámica no lineal del gasificador Imbert con precalentamiento de aire, ya que complementa a los trabajos disponibles en la literatura agregando el modelo del precalentador de aire como una unidad integrada al reactor.

2.3. Contribuciones del Capítulo

1. Se completa el modelado del gasificador Imbert (reportado en la literatura), agregando las ecuaciones del precalentador de aire (contribución de esta tesis).
2. Se aplican suposiciones estándar de modelado de reactores químicos y de intercambiadores de calor, para reducir el orden del modelo obtenido, el cual será empleado en los siguientes Capítulos para realizar el estudio del gasificador.

CAPÍTULO 3

IMPLEMENTACIÓN DEL MODELO COMPUTACIONAL

En este Capítulo se presenta de manera general el modelo en ecuaciones diferenciales parciales (bajo suposiciones estándar) obtenido en el Capítulo 2, sobre el cual se aplica una discretización espacial por diferencias finitas obteniendo una representación en dimensión finita. Con los modelos obtenidos, se formula técnicamente el problema de modelado de la dinámica no lineal del gasificador Imbert. Posteriormente, se introducen las definiciones básicas de la metodología de modelado eficiente propuesta por Badillo-Hernandez et al. (2019), para poder utilizarla como herramienta para describir el comportamiento no lineal del reactor. Finalmente, se presenta al gasificador Imbert con precalentamiento de aire, que forma parte sistemas de gasificación escala piloto de la empresa All Power Labs, con el cual se realiza el análisis en Capítulos siguientes, presentando los rangos de operación de las variables de entrada y las condiciones nominales de operación para las cuales se poseen datos experimentales.

3.1. Representaciones generales del gasificador con precalentamiento de aire

El desarrollo presentado en las subsecciones 3.1.1 y 3.1.2 para el gasificador Imbert, es una adaptación del realizado por Badillo-Hernandez et al. (2019) para un gasificador estratificado, las representaciones obtenidas son necesarias para aplicar las ideas de la técnica de modelado eficiente.

3.1.1. Modelo de dimensión infinita

El modelo (2.3) del gasificador Imbert con precalentamiento de aire presentado en el Capítulo 2, se puede escribir de manera general como:

- Balances de masa en el reactor

$$Q_g(Z, t) : 0 \approx F_{Q_g}(Q_g, Q_s, \mathbf{C}_g, \mathbf{C}_s, T, Q_{ge}), \quad B_{Q_g}(Q_g, \mathbf{C}_g, \mathbf{C}_s, T) = 0 \quad (3.1a)$$

$$\mathbf{C}_g(Z, t) : 0 \approx F_{\mathbf{C}_g}(Q_g, Q_s, \mathbf{C}_g, \mathbf{C}_s, T, \mathbf{C}_{ge}), \quad B_{\mathbf{C}_g}(Q_g, \mathbf{C}_g, \mathbf{C}_s, T) = 0 \quad (3.1b)$$

$$Q_s(Z, t) : 0 \approx F_{Q_s}(Q_g, Q_s, \mathbf{C}_g, \mathbf{C}_s, T), \quad B_{Q_s}(Q_s, \mathbf{C}_g, \mathbf{C}_s, T, Q_{se}) = 0 \quad (3.1c)$$

$$\mathbf{C}_s(Z, t) : \partial_t \mathbf{C}_s = F_{\mathbf{C}_s}(Q_g, Q_s, \mathbf{C}_g, \mathbf{C}_s, T), \quad B_{\mathbf{C}_s}(Q_s, \mathbf{C}_g, \mathbf{C}_s, T, \mathbf{C}_{se}) = 0 \quad (3.1d)$$

- Balance de energía en el reactor

$$T(z, t) : H_b \partial_t T = F_T(Q_g, Q_s, \mathbf{C}_s, T, T_h, T_c, Q_{ge}), \quad B_T(Q_g, Q_s, \mathbf{C}_s, T, T_h) = 0 \quad (3.1e)$$

- Balance de energía en el intercambiador de calor

$$T_c(Z, t) : 0 \approx F_{T_c}(Q_g, T, T_c, T_h), \quad B_{T_c}(Q_g, T, T_h, T_{ge}) = 0 \quad (3.1f)$$

$$T_h(Z, t) : H_w \partial_t T_h = F_{T_h}(Q_g, T, T_c, T_h, T_a), \quad B_{T_h}(Q_g, T, T_h) = 0 \quad (3.1g)$$

donde

$$\partial_t = \frac{\partial}{\partial t}$$

F_ν es el operador diferencial en el dominio espacial asociado al perfil de estado (cuasi-estático/dinámico) ν , B_ν es la condición de frontera correspondiente, H_b (o H_w) es la capacitancia térmica asociada al lecho (o a la pared), T_a es la temperatura del ambiente, t es la variable temporal, y $0 \leq Z \leq L$ es la coordenada espacial. Los perfiles de estado ν son cuasiestacionarios (QS) o dinámicos (D), donde:

- Q_g es el perfil de flujo de gases (QS).
- \mathbf{C}_g es el vector con los perfiles de concentración de gas (QS).
- Q_s es el perfil de flujo de sólidos (QS).
- \mathbf{C}_s es el vector con los perfiles de concentración de sólidos (D).
- T es el perfil de temperatura dentro del reactor (D).
- T_c es el perfil de temperatura del aire frío (QS).
- T_h es el perfil de temperatura del gas de síntesis caliente (D) en la sección anular.

El modelo (3.1) incluye las ecuaciones del intercambiador de calor acopladas con los balances de masa y energía dentro del reactor, se puede escribir en forma compacta como

$$\partial_t \boldsymbol{\chi} = \mathbf{F}_\boldsymbol{\chi}(\boldsymbol{\chi}, \boldsymbol{\psi}, \partial_Z \boldsymbol{\chi}, \partial_{ZZ} \boldsymbol{\chi}, \mathbf{d}, \mathbf{p}), \quad \mathbf{B}_\boldsymbol{\chi}(\boldsymbol{\chi}, \partial_Z \boldsymbol{\chi}, \boldsymbol{\psi}, \mathbf{d}, \mathbf{p}) = 0, \quad \boldsymbol{\chi}(0) = \boldsymbol{\chi}_0 \quad (3.2a)$$

$$0 = \mathbf{F}_\boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{\chi}, \boldsymbol{\psi}, \partial_Z \boldsymbol{\psi}, \mathbf{d}, \mathbf{p}), \quad \mathbf{B}_\boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{\chi}, \boldsymbol{\psi}, \mathbf{d}, \mathbf{p}) = 0 \quad (3.2b)$$

$$\partial_Z = \frac{\partial}{\partial Z}, \quad \partial_{ZZ} = \frac{\partial^2}{\partial Z^2}$$

donde

$$\boldsymbol{\chi}(t) = [\mathbf{C}_s^T \ T \ T_h]^T(Z, t) \quad (3.2c)$$

$$\boldsymbol{\psi}(t) = [Q_g \ Q_s \ \mathbf{C}_g^T \ T_c]^T(Z, t), \quad 0 \leq Z \leq L, \ t \geq 0 \quad (3.2d)$$

$$\mathbf{d} = [Q_{se} \ Q_{ge} \ \mathbf{C}_{se}^T \ \mathbf{C}_{ge}^T \ T_{se} \ T_{ge} \ T_a]^T \quad (3.2e)$$

$$\boldsymbol{\psi} = \mathcal{G}(\boldsymbol{\chi}, \mathbf{d}, \mathbf{p}) \quad (3.2f)$$

$\boldsymbol{\chi}$ (o $\boldsymbol{\psi}$) es el conjunto de perfiles de estados dinámicos (o cuasiestáticos), $\mathbf{F}_\boldsymbol{\chi}$ (o $\mathbf{F}_\boldsymbol{\psi}$) es el operador diferencial en el dominio espacial con condiciones de frontera $\mathbf{B}_\boldsymbol{\chi}$ (o $\mathbf{B}_\boldsymbol{\psi}$), \mathbf{d} es el vector con entradas exógenas, \mathbf{p} es el vector con los parámetros de cinética y transporte, n_s (o n_g) es el número de componentes en fase sólida (o gas). La ecuación (3.2f) es la solución única de los perfiles $\boldsymbol{\psi}$ en estado QS de la EDO (3.2b).

Para fines de análisis de la dinámica no lineal del sistema, al sustituir la ecuación (3.2f) en (3.2a) se obtiene una representación de entrada-estado-salida del modelo, de la forma

$$\partial_t \boldsymbol{\chi} = \mathcal{F}(\boldsymbol{\chi}, \mathbf{d}, \mathbf{p}), \quad \mathcal{B}(\boldsymbol{\chi}, \mathbf{d}, \mathbf{p}) = 0, \quad \boldsymbol{\chi}(0) = \boldsymbol{\chi}_0 \quad (3.3a)$$

$$\boldsymbol{\psi} = \mathcal{G}(\boldsymbol{\chi}, \mathbf{d}, \mathbf{p}) \quad (3.3b)$$

donde

$$(\mathcal{F}, \mathcal{B})(\boldsymbol{\chi}, \mathbf{d}, \mathbf{p}) = [(\mathbf{F}_{\boldsymbol{\chi}}, \mathbf{B}_{\boldsymbol{\chi}})(\boldsymbol{\chi}, \boldsymbol{\psi}, \mathbf{d}, \mathbf{p})]_{\boldsymbol{\psi}=\mathcal{G}(\boldsymbol{\chi}, \mathbf{d}, \mathbf{p})} \quad (3.3c)$$

Para valores nominales de entrada $\bar{\mathbf{d}}$ y parámetros \mathbf{p} , se tiene el conjunto límite (CL) del sistema

$$\Sigma(\mathbf{p}, t) = \Sigma_S(\mathbf{p}, t) \cup \Sigma_l(\mathbf{p}, t) \quad (3.4a)$$

$$\Sigma_S(\mathbf{p}) = \{\bar{\boldsymbol{\chi}}_1, \dots, \bar{\boldsymbol{\chi}}_{n_S}\} \ni \mathcal{F}(\bar{\boldsymbol{\chi}}_i, \bar{\mathbf{d}}, \mathbf{p}) = \mathbf{0}, \quad \mathcal{B}(\boldsymbol{\chi}, \mathbf{d}, \mathbf{p}) \quad (3.4b)$$

$$\Sigma_l(\mathbf{p}, t) = \{\bar{\boldsymbol{\chi}}_1(t), \dots, \bar{\boldsymbol{\chi}}_{n_l}(t)\} \ni \mathcal{F}(\bar{\boldsymbol{\chi}}_i, \bar{\mathbf{d}}, \mathbf{p}) = \partial_t \bar{\boldsymbol{\chi}}_i(t), \quad \mathcal{B}(\boldsymbol{\chi}, \mathbf{d}, \mathbf{p}) \quad (3.4c)$$

donde Σ representa el CL del sistema, compuesto por el conjunto Σ_S de estados estacionarios (EE) $\bar{\boldsymbol{\chi}}_i$ y el conjunto Σ_l de ciclos límite $\bar{\boldsymbol{\chi}}_i(t)$.

Para valores dados de $[\boldsymbol{\chi}_0, \mathbf{d}(t), \mathbf{p}]$ evaluados en el modelo (3.3), existen trayectorias únicas de los estados dinámicos y cuasiestáticos

$$\boldsymbol{\chi}(t) = \boldsymbol{\tau}_{\boldsymbol{\chi}}(t, \boldsymbol{\chi}_0, \mathbf{d}(t), \mathbf{p}) \quad (3.5a)$$

$$\boldsymbol{\psi}(t) = \boldsymbol{\tau}_{\boldsymbol{\psi}}(t, \boldsymbol{\chi}_0, \mathbf{d}(t), \mathbf{p}) \quad (3.5b)$$

donde $\boldsymbol{\tau}_{\boldsymbol{\chi}}$ y $\boldsymbol{\tau}_{\boldsymbol{\psi}}$ son mapeos de transición, y

$$\boldsymbol{\tau}_{\boldsymbol{\psi}}(t, \boldsymbol{\chi}_0, \mathbf{d}(t), \mathbf{p}) := \mathcal{G}(\boldsymbol{\chi}, \mathbf{d}, \mathbf{p})|_{\boldsymbol{\chi}=\boldsymbol{\tau}_{\boldsymbol{\chi}}(t, \boldsymbol{\chi}_0, \mathbf{d}(t), \mathbf{p})} \quad (3.5c)$$

Las ecuaciones presentadas previamente, representan el comportamiento estático (3.4) y transitorio (3.5) del modelo (3.1) del gasificador Imbert.

3.1.2. Modelo de dimensión finita

Para obtener una representación de dimensión finita del modelo en forma compacta (3.2), se emplea un esquema de discretización espacial por diferencias finitas, utilizando diferencias de primer orden hacia atrás para términos convectivos y diferencias centradas de segundo orden para los términos dispersivos (Hundsdoerfer y Verwer, 2003), mediante

$$\partial_Z(\cdot) \approx \frac{(\cdot)_i - (\cdot)_{i-1}}{\Delta}, \quad 1 \leq i \leq N \quad (3.6a)$$

$$\partial_{ZZ}(\cdot) \approx \frac{(\cdot)_{i+1} - 2(\cdot)_i + (\cdot)_{i-1}}{\Delta^2}, \quad 2 \leq i \leq N-1, \quad N \in \mathcal{N} = [1, \infty) \quad (3.6b)$$

$$\Delta = Z_i - Z_{i-1}$$

Aproximando las derivadas espaciales del modelo en EDP (3.2) mediante (3.6), se obtiene el modelo en forma compacta del reactor Imbert en ecuaciones algebraicas diferenciales (EAD) como

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}_{\mathbf{x}}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\zeta}, \mathbf{d}, \mathbf{p}, N), \quad \mathbf{x}(0) = \mathbf{x}_0, \quad N \in \mathcal{N} \quad (3.7a)$$

$$0 = \mathbf{f}_{\boldsymbol{\zeta}}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\zeta}, \mathbf{d}, \mathbf{p}, N) \quad (3.7b)$$

donde

$$n = n_{\mathbf{x}} + n_{\boldsymbol{\zeta}}, \quad (n_{\mathbf{x}}, n_{\boldsymbol{\zeta}}) = \dim(\mathbf{x}, \boldsymbol{\zeta})$$

$$n_{\mathbf{x}} = n_{\boldsymbol{\chi}} N = (n_s + 2)N, \quad n_{\boldsymbol{\zeta}} = n_{\boldsymbol{\psi}} N = (n_g + 3)N \quad (3.7c)$$

$n_{\mathbf{x}}$ (o $n_{\boldsymbol{\zeta}}$) es el número de ecuaciones diferenciales (o algebraicas) determinadas por el

modelo discretizado de orden N (también llamado modelo de N etapas), en conjunción con el número de especies gas (n_g) y sólidas (n_s), n es el número total de ecuaciones (diferenciales y algebraicas) del modelo. Cabe mencionar que esta versión del modelo es la que se utiliza para calcular la solución numérica del sistema de EADs.

En una representación entrada-estado-salida de dimensión finita, que se utiliza de manera conceptual para el estudio de la dinámica no lineal del sistema, el modelo (3.7) se puede escribir como

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{d}, \mathbf{p}, N), \quad \mathbf{x}(0) = \mathbf{x}_0, \quad N \in \mathcal{N} = [1, \infty) \quad (3.8a)$$

$$\boldsymbol{\zeta} = \mathbf{g}(\mathbf{x}, \mathbf{d}, \mathbf{p}, N) \quad (3.8b)$$

donde

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{d}, \mathbf{p}, N) = [\mathbf{f}_x(\mathbf{x}, \boldsymbol{\zeta}, \mathbf{d}, \mathbf{p}, N)]_{\boldsymbol{\zeta}=\mathbf{g}(\mathbf{x}, \mathbf{d}, \mathbf{p}, N)} \quad (3.8c)$$

$$\boldsymbol{\zeta} = \mathbf{g}(\mathbf{x}, \mathbf{d}, \mathbf{p}, N) : \text{es la solución única para } \boldsymbol{\zeta} \text{ de (3.7b)} \quad (3.8d)$$

\mathbf{x} (o $\boldsymbol{\zeta}$) es el vector de estados dinámicos (o cuasiestáticos), \mathbf{d} es el vector de entradas exógenas.

Para valores nominales de entrada $\bar{\mathbf{d}}$, de parámetros \mathbf{p} , así como un orden N de modelo dados, el conjunto límite (CL) del modelo en EDOs (3.8) es

$$S(\mathbf{p}, N, t) = S_S(\mathbf{p}, N, t) \cup S_l(\mathbf{p}, N, t) \quad (3.9a)$$

$$S_S(\mathbf{p}, N) = \{\bar{\mathbf{x}}_1, \dots, \bar{\mathbf{x}}_{n_s}\}, \quad \mathbf{f}_x(\bar{\mathbf{x}}_i, \bar{\mathbf{d}}, \mathbf{p}, N) = \mathbf{0} \quad (3.9b)$$

$$S_l(\mathbf{p}, N, t) = \{\bar{\mathbf{x}}_1(t), \dots, \bar{\mathbf{x}}_{n_l}(t)\}, \quad \mathbf{f}_x(\bar{\mathbf{x}}_i, \bar{\mathbf{d}}, \mathbf{p}, N) = \dot{\bar{\mathbf{x}}}_i(t) \quad (3.9c)$$

donde S son los conjuntos límite conformados por el conjunto S_S de EEs $\bar{\mathbf{x}}_i$ y el conjunto S_l de ciclos límite $\bar{\mathbf{x}}_i(t)$ asociados con los parámetros nominales de entrada $(\mathbf{p}, \bar{\mathbf{d}})$.

Para una condición inicial de entrada y un orden de modelo dados $[\mathbf{x}_0, \mathbf{d}(t), \mathbf{p}, N]$ la EDO (3.8a) posee una trayectoria única de solución $\mathbf{x}(t)$, la cual mediante (3.8b) determina una trayectoria cuasiestacionaria $\boldsymbol{\zeta}(t)$, que determinan la evolución de los perfiles de estado y cuasiestacionarios como

$$\mathbf{x}(t) = \boldsymbol{\tau}_x(t, \mathbf{x}_0, \mathbf{d}(t), \mathbf{p}, N), \quad N \in \mathcal{N} \quad (3.10a)$$

$$\boldsymbol{\zeta}(t) = \boldsymbol{\tau}_\zeta(t, \mathbf{x}_0, \mathbf{d}(t), \mathbf{p}, N) \quad (3.10b)$$

donde $\boldsymbol{\tau}_x, \boldsymbol{\tau}_\zeta$ son mapeos de transición y

$$\boldsymbol{\tau}_\zeta(t, \mathbf{x}_0, \mathbf{d}(t), \mathbf{p}) = \mathbf{g}(\mathbf{x}, \mathbf{d}, \mathbf{p}) \big|_{\mathbf{x}=\boldsymbol{\tau}_x(t, \mathbf{x}_0, \mathbf{d}(t), \mathbf{p})} \quad (3.10c)$$

Los perfiles de trayectorias descritos por las ecuaciones (3.10a) y (3.10b) están definidos en las ubicaciones determinadas por el esquema de discretización empleado, aplicando una interpolación mediante splines cúbicos (\mathcal{J}) (De Boor, 2001), es posible obtener perfiles de trayectorias continuos

$$\widehat{\boldsymbol{\chi}}(Z, t) = \mathcal{J}_x(Z) \mathbf{x}(t) \quad (3.11a)$$

$$\widehat{\boldsymbol{\psi}}(Z, t) = \mathcal{J}_\zeta(Z) \boldsymbol{\zeta}(t) \quad (3.11b)$$

Por la propiedad de convergencia del método de discretización, conforme el orden N del modelo de dimensión finita se incrementa (tendiendo a infinito), las trayectorias de los perfiles interpolados $(\widehat{\boldsymbol{\chi}}, \widehat{\boldsymbol{\psi}})$ (3.11) y los conjuntos límite S (3.9) asociados, convergen a las trayectorias de los perfiles $(\boldsymbol{\chi}, \boldsymbol{\psi})$ (3.5) y los conjuntos límite Σ (3.4) del modelo descrito en EDP

$$N \rightarrow \infty \Rightarrow (\widehat{\boldsymbol{\chi}}, \widehat{\boldsymbol{\psi}})(Z, t) \rightarrow (\boldsymbol{\chi}, \boldsymbol{\psi})(Z, t), \quad S(\mathbf{p}, N, t) \rightarrow \Sigma(\mathbf{p}, t) \quad (3.12)$$

El orden N del modelo, es un grado de libertad en el modelado del reactor. Dependiendo de la forma en que discretice al gasificador se pueden tener modelos:

- Unidimensionales en dirección axial (Yucel y Hastaoglu, 2016; Simone et al., 2013; Jaojaruek, 2014), donde los resolvedores de EDP consideran discretizaciones espaciales de 200 a 460 nodos, considerando 17 ó 13 EDPs que resultan en 3,400 ó 5,980 EDOs, respectivamente.
- Bidimensionales en direcciones axial y radial (Janajreh y Al Shrah, 2013; Masmou-di, Sahraoui, Grioui, y Halouani, 2014a), que plantean discretizaciones de 4,000 a 53,155 nodos, considerando 11 u 8 EDPs que resultan en 44,000 u 850,480 EDOs, respectivamente.

Ambos enfoques de discretización proporcionan información valiosa para el análisis del gasificador y han sido aprovechadas por los autores para estudiar el estado estacionario de operación de interés, sin embargo no se ha abordado el estudio de las características de la dinámica no lineal del gasificador.

En principio, los conjuntos límite (3.9) del gasificador pueden ser determinados al aplicar análisis de bifurcación basado en métodos de continuación numérica (Doedel et al., 1991; Keller, 1977; Kuznetsov, 1998; Seydel, 2010) al modelo en EADs de orden N_{pde} (3.7), sin embargo la aplicación directa de los paquetes computacionales para la solución de EDP y continuación numérica para reactores tubulares con muchos perfiles (de 10 a 20), se convierte en una tarea difícil e incluso irresoluble, ya que la carga computacional crece rápidamente con el número de EADs y con la complejidad de los conjuntos límite (Allgower y Georg, 1990; Jonkhout, 2019).

El enfoque de modelado por etapas o celdas (Deans y Lapidus, 1960; Deckwer, 1974; Levenspiel y Bischoff, 1964), propone al tamaño de partícula como la unidad fundamental para realizar la discretización del reactor (debido a su naturaleza heterogénea), lo que da como resultado modelos de bajo orden que reducen la excesiva carga de trabajo computacional debida al sobremodelado y mal condicionamiento del problema de los resolvedores estándar de EDP, sin embargo este enfoque carece de un criterio específico para evitar la alteración de los conjuntos límite debido a la subdiscretización del modelo. El *enfoque de modelado eficiente para reactores tubulares* propuesto por Badillo-Hernandez et al. (2019) proporciona un procedimiento sistemático (con respaldo teórico) para elegir:

1. El orden eficiente de modelo

$$N_S = \mathcal{E}_S(\tilde{\mathbf{p}}) < N_{pde}, \quad S_S(\mathbf{p}, t) = \widehat{S}(N_S, \mathbf{p}, t) \quad (3.13a)$$

que describe confiable (con respecto al cambio en el orden N) y cualitativamente (considerando incertidumbre en parámetros $\tilde{\mathbf{p}}$) el CL S_S (3.9a).

2. El orden eficiente de modelo

$$N_t = \mathcal{E}_t(\tilde{\mathbf{p}}) \geq N_S, \quad \Xi_t(\mathbf{p}, t) = \widehat{\Xi}(\mathbf{p}, N_t, t), \quad \Xi(\mathbf{p}, N_{pde}, t) = \{x_1(t), \dots, x_{n_m}(t)\} \quad (3.13b)$$

que garantiza la descripción del CL S_S (3.9a) sobre un conjunto de trayectorias Ξ de interés.

La obtención de los órdenes N_S y N_t , constituye el objetivo de la metodología de modelado eficiente, los modelos resultantes de utilizar estos órdenes serán utilizados para la descripción de los conjuntos límite y el comportamiento transitorio en un gasificador Imbert con precalentamiento de aire.

3.2. Formulación técnica del problema

Los trabajos de modelado de gasificadores Imbert con precalentamiento de aire (Yucel y Hastaoglu, 2016; Simone et al., 2013; Janajreh y Al Shrah, 2013; Masmoudi et al., 2014b; Jaojaruek, 2014) se han enfocado al análisis local de un estado estacionario nominal de operación, sin embargo los autores no han incluido en su análisis el modelo de la unidad de precalentamiento de aire, que de la teoría de reactores tubulares (Heinemann y Poore, 1981; Morud y Skogestad, 1998; Puszynski y Hlaváček, 1980) se sabe puede conllevar efectos benéficos o perjudiciales en la operación del reactor.

El problema a resolver consiste en evaluar por primera vez la dinámica no lineal de un gasificador Imbert con precalentamiento de aire (3.1), lo cual implica:

- Contar con el modelo en EDP del precalentador de aire e interconectarlo con el modelo del gasificador.
- Determinar la multiplicidad de estados estacionarios (EEs) y ciclos límite, así como indagar en la estabilidad robusta de la operación nominal reportada previamente en estudios experimentales y basados en modelo.
- Estudiar la dependencia de los conjuntos límite (EEs y ciclos límite) respecto a variaciones en el contenido de humedad en la biomasa y en el flujo de aire suministrado, dentro de rangos aceptables.
- Analizar el comportamiento transitorio de trayectorias de interés, como son la respuesta a pulsos de aire y el arranque del reactor.

El problema se resuelve mediante la combinación de nociones y herramientas de modelado de reactores tubulares (Baldea y Daoutidis, 2012; Hlavacek, 1970; Gøbel et al., 2007) e intercambiadores de energía (Correa y Marchetti, 1987; Gutierrez R. y Cooper, 1979; Mathisen et al., 1994), así como de discretización eficiente de EDP en combinación con análisis de bifurcación numérica (Badillo-Hernandez et al., 2019). El enfoque de modelado eficiente ha sido probado en un reactor estratificado sin precalentamiento de aire, en este trabajo se aplica y extiende su uso en un gasificador Imbert comercial de escala piloto (AllPowerLabs, 2021) que, comparado con el reactor estratificado presenta un patrón de flujo más complejo (debido a los cambios en la geometría interna y la zona de inyección de aire) y una etapa de precalentamiento de aire. El gasificador Imbert considerado para este trabajo ha sido objeto de estudio en trabajos experimentales (Shen et al., 2019; Nisamanee et al., 2015; Maneerung et al., 2018) y basados en modelo (Yucel y Hastaoglu, 2016; Janajreh y Al Shrah, 2013; Rodriguez-Alejandro et al., 2018; Li et al., 2019), pero para el cual no ha sido determinada su dinámica no lineal. Los resultados obtenidos en este trabajo demuestran que el gasificador Imbert puede ser mono, bi o triestable (con 1, 2 ó 3 EEs estables, respectivamente) y que no cuenta con ciclos límite dentro de los rangos de evaluación utilizados.

3.3. Modelado de la dinámica no lineal mediante discretización eficiente

En esta sección se recuperan las definiciones indispensables y las nociones básicas del enfoque de modelado eficiente de reactores exotérmicos tubulares dadas por Badillo-Hernandez

et al. (2019), que son requeridas para la caracterización de la multiplicidad y la bifurcación del gasificador Imbert bajo estudio (3.7), para mayores detalles sobre la derivación del método, consideraciones de implementación y paquetería numérica utilizada, consultar el documento citado.

3.3.1. Descripción de conjuntos límite

Definición 1 (Conjuntos límite calculados). Del modelo en EDOs (3.8) para el gasificador Imbert, se define a $\widehat{S}(\mathbf{p}, N, t)$ como los conjuntos límite (CL) calculados para los órdenes de modelo N , que van desde 1 hasta N_{pde}

$$\widehat{S}(\mathbf{p}, N, t), \quad N \in \mathcal{N}_{pde} = [1, N_{pde}] \quad (3.14)$$

Definición 2 (Modelo estructuralmente estable). Se dice que el modelo (3.8) es estructuralmente estable (Kuznetsov, 1998; Seydel, 2010) si los conjuntos límite $\widehat{S}(\mathbf{p}, N, t)$ son topológicamente invariantes (es decir que los conjuntos límite son los mismos cualitativamente) en el intervalo \mathcal{N}

$$\mathcal{N} = [N^-, \dots, N_{pde}] \subseteq \mathcal{N}_{pde} \quad (3.15)$$

Definición 3 (Orden de confiabilidad). El orden de confiabilidad N^- es el orden mínimo a partir del cual el modelo es estructuralmente estable (no se modifican los CL), determina el límite inferior del intervalo \mathcal{N} y se obtiene del orden último de bifurcación N^*

$$N^- \geq N^* + 1 \quad (3.16)$$

Definición 4 (Errores paramétrico (p) y de discretización (d) (para conjuntos límite)). A partir de los conjuntos límite calculados (3.14) en el intervalo \mathcal{N} , se tiene:

$$\varepsilon_p^S(\tilde{\mathbf{p}}) = \left| \widehat{S}(\mathbf{p} + \tilde{\mathbf{p}}, N_{pde}, t) - \widehat{S}(\mathbf{p}, N_{pde}, t) \right|_S \quad (3.17)$$

el error paramétrico inducido en el CL para $N = N_{pde}$, debido a un error típico en los parámetros de cinética y transporte químicos $\tilde{\mathbf{p}}$, cuando se consideran los valores nominales de los parámetros se tiene que $\varepsilon_p^S(\mathbf{0}) = 0$, y

$$\varepsilon_d^S(N) = \left| \widehat{S}(\mathbf{p}, N, t) - \widehat{S}(\mathbf{p}, N_{pde}, t) \right|_S \quad (3.18)$$

el error de discretización de los modelos de orden N con respecto al modelo de orden N_{pde} (con valores nominales de \mathbf{p}), cuando se considera $N = N_{pde}$ se tiene que $\varepsilon_d^S(N_{pde}) = 0$. $|\cdot|_S$ es una norma espacial definida en el Apéndice B.

Definición 5 (Orden eficiente N_S). Para la descripción de los conjuntos límite (3.9) del gasificador (3.1), se define el orden eficiente N_S como el número entero

$$N_S = \min_{N \in \mathcal{N}} |\varepsilon_d^S(N) - \varepsilon_p^S(\tilde{\mathbf{p}})| := \mathcal{E}_S(\mathbf{p}, \tilde{\mathbf{p}}) \quad (3.19)$$

que minimiza la diferencia entre los errores paramétrico (3.17) y de discretización (3.18), en el intervalo \mathcal{N} .

El par orden eficiente-conjunto límite (N_S, S_S) (3.13a) se determina siguiendo un procedimiento de cuatro pasos:

- **Paso 1.** Se calcula el orden confiable N^- (utilizando N -continuación desde $N = 1$ hasta N^- , detalles en Badillo-Hernandez et al. (2019))

- **Paso 2.** Se dibuja (con análisis de propagación de error de parámetro a estado (Atherton, Schainker, y Ducot, 1975; Cacuci, 2003)) la línea de error paramétrico

$$\mathcal{C}_p^S = \{(N, \varepsilon) \in \Lambda \mid \varepsilon = \varepsilon_p^S(\tilde{\mathbf{p}})\}, \quad \Lambda : \text{plano orden-error} \quad (3.20a)$$

- **Paso 3.** Se dibuja (con N -continuación para $N = N^-$ a N_{pde}) la curva de error de discretización

$$\mathcal{C}_d^S = \{(N, \varepsilon) \in \Lambda \mid \varepsilon = \varepsilon_d^S(\tilde{\mathbf{p}})\}, \quad N \in \mathcal{N} \quad (3.20b)$$

- **Paso 4.** De la intersección entre \mathcal{C}_p^S y \mathcal{C}_d^S , se determina el orden eficiente y su conjunto límite

$$N_S = \mathcal{E}_S(\tilde{\mathbf{p}}), \quad S_S = \widehat{S}(N_S) \quad (3.20c)$$

3.3.2. Descripción de conjuntos límite y comportamiento transitorio

Definición 6 (Errores paramétrico (p) y de discretización (d) (para comportamiento transitorio)). A partir de trayectorias de interés Ξ para modelos de orden N en el intervalo \mathcal{N}_Ξ , se tiene:

$$\varepsilon_p^\Xi(\tilde{\mathbf{p}}) = \left| \widehat{\Xi}(\mathbf{p} + \tilde{\mathbf{p}}, N_{pde}, t) - \widehat{\Xi}(\mathbf{p}, N_{pde}, t) \right|_\Xi \quad (3.21)$$

el error paramétrico inducido en el conjunto de trayectorias Ξ para $N = N_{pde}$, debido a un error típico en los parámetros de cinética y transporte químicos $\tilde{\mathbf{p}}$, cuando se consideran los valores nominales de los parámetros se tiene que $\varepsilon_p^\Xi(\mathbf{0}) = 0$, y

$$\varepsilon_d^\Xi(N) = \left| \widehat{\Xi}(\mathbf{p}, N, t) - \widehat{\Xi}(\mathbf{p}, N_{pde}, t) \right|_\Xi, \quad N \in \mathcal{N}_\Xi := [N_S, N_{pde}] \quad (3.22)$$

el error de discretización de los modelos de orden N con respecto al modelo de orden N_{pde} (con valores nominales de \mathbf{p}), cuando se considera $N = N_{pde}$ se tiene que $\varepsilon_d^\Xi(N_{pde}) = 0$. $|\cdot|_\Xi$ es una norma espacio-temporal definida en el Apéndice B.

Definición 7 (Orden eficiente N_t). Para la descripción de los conjuntos límite (3.9) y las trayectorias Ξ del gasificador (3.1), se define el orden eficiente N_t como el número entero

$$N_t = \min_{N \in \mathcal{N}_\Xi} |\varepsilon_d^\Xi(N) - \varepsilon_p^\Xi(\tilde{\mathbf{p}})| := \mathcal{E}_t(\mathbf{p}, \tilde{\mathbf{p}}) \ni N_t \geq N_S \quad (3.23)$$

que minimiza la diferencia entre los errores paramétrico (3.21) y de discretización (3.22), en el intervalo \mathcal{N}_Ξ .

El orden eficiente N_t se determina siguiendo un procedimiento de tres pasos:

- **Paso 1.** Se dibuja (con análisis de propagación de error de parámetro a estado) la línea de error paramétrico

$$\mathcal{C}_p^\Xi = \{(N, \varepsilon) \in \Lambda \mid \varepsilon = \varepsilon_p^\Xi(\tilde{\mathbf{p}})\} \quad (3.24a)$$

- **Paso 2.** Se dibuja (con N -continuación para $N = N^-$ a N_{pde}) la curva de error de discretización

$$\mathcal{C}_d^\Xi = \{(N, \varepsilon) \in \Lambda \mid \varepsilon = \varepsilon_d^\Xi(\tilde{\mathbf{p}})\}, \quad N \in \mathcal{N}_\Xi \quad (3.24b)$$

- **Paso 3.** De la intersección entre \mathcal{C}_p^Ξ y \mathcal{C}_d^Ξ , se determina el orden eficiente y su conjunto límite

$$N_t = \mathcal{E}_t(\tilde{\mathbf{p}}) \geq N_S, \quad \Xi_t = \widehat{\Xi}(N_t) \quad (3.24c)$$

Las definiciones presentadas previamente, son las fundamentales para comprender la

Tabla 3.1: Rango de valores y valor nominal de parámetros de alimentación

Propiedad	Rango	Nominal
Porosidad del lecho (ε)	0.3-0.65	0.5
Tamaño de partícula (d_{p0}) – [cm]	0.5-4	1
Flujo de biomasa (F_{se}) – [kg/h]	3.5-10	3.8
Relación aire-biomasa (W_{ab})	1.0-1.6	1.2
Contenido de humedad (M) – [%]	0-30	7.28

Tabla 3.2: Dimensiones de gasificador Imbert bajo estudio

Diámetros internos [m]	$[D_1, D_2, D_3] = [0.254, 0.0762, 0.1905]$
Longitud de secciones [m]	$[L_1, L_2, L_3] = [0.2793, 0.3428, 0.4952]$ $[L, Z_e] = [0.55, 0.2920]$

aplicación de la metodología de modelado eficiente al gasificador Imbert con precalentamiento de aire que se toma como caso de estudio.

3.4. Caso de estudio

El gasificador Imbert considerado para este estudio opera bajo las propiedades y los flujos de alimentación dentro de los rangos indicados en la Tabla 3.1. Ha sido estudiado en trabajos experimentales (Shen et al., 2019; Nisamaneenate et al., 2015; Maneerung et al., 2018) y de simulación (Yucel y Hastaoglu, 2016; Janajreh y Al Shrah, 2013; Rodriguez-Alejandro et al., 2018; Li et al., 2019), en los cuales se reporta:

- Una operación idónea bajo condiciones nominales de trabajo.
- Que el precalentamiento de aire es benéfico para el proceso en términos energéticos.
- Que las descripciones con base en modelo, reproducen adecuadamente los perfiles de temperatura y/o concentración del gas de síntesis en estado estacionario.

Para realizar el análisis de la dinámica no lineal global en esta clase de reactores, se trabajará en específico con el gasificador utilizado por Yucel y Hastaoglu (2016), debido a que forma parte de un sistema de gasificación donde el reactor se puede considerar como una unidad independiente (no hay cubeta de secado ni pireactor), sus dimensiones se reportan en la Tabla 3.2. Este gasificador resulta adecuado para el análisis, debido a que no está interconectado con elementos adicionales que puedan afectar su operación (lo cual sale de los alcances de esta investigación), además que reportan con detalle las condiciones nominales de operación del gasificador (tercera columna de Tabla 3.1) utilizando pellets de madera (50.67 %C, 40.97 %O, 6.18 %H, 2 %N, 0.18 %S) con densidad inicial de 832 [kg/m³], así como los datos experimentales de temperatura y composición de gas de síntesis en estado estacionario (Tabla 3.3).

El gasificador se encuentra instrumentado con:

- 7 termopares tipo K distribuidos dentro del reactor, en las ubicaciones reportadas en la Tabla 3.3 (medidas desde la cima).

Tabla 3.3: Ubicación de termopares, registro de temperaturas y composición del gas de síntesis en EE

Ubicación de termopares [m]	$[Z_1, Z_2, Z_3, Z_4] = [0, 0.06, 0.12, 0.18]$ $[Z_5, Z_6, Z_7] = [0.24, 0.30, 0.48]$
Temperatura en termopares [K]	$[T_{Z_1}, T_{Z_2}, T_{Z_3}, T_{Z_4}] = [300, 390, 510, 510]$ $[T_{Z_5}, T_{Z_6}, T_{Z_7}] = [900, 1100, 880]$
Fracción molar de gas de síntesis (%)	$[H_2, CO, CO_2, CH_4] = [14.71, 26.07, 10.4, 3.42]$

- Un analizador de gases infrarrojo (Wuhan Cubic Syngas Analyzer Gas Board 3100P) conectado a la salida del reactor.

El modelo computacional presentado en este Capítulo, con los parámetros de alimentación nominal (Tabla 3.1), así como los parámetros de cinética química y la propiedades de los materiales del intercambiador de calor reportados en el Apéndice A, es la base para el análisis de la dinámica no lineal global del gasificador Imbert bajo estudio. En los Capítulos siguientes se presentan los resultados e implicaciones en la operación en régimen estacionario (Capítulos 4 y 5) y transitorio (Capítulo 6).

3.5. Contribuciones de Capítulo

1. Se obtiene la versión del modelo en dimensión finita (3.7) que se utiliza para realizar las simulaciones numéricas y el análisis de la dinámica no lineal.
2. Se presentan las definiciones necesarias para aplicar la metodología de modelado eficiente en el gasificador Imbert.
3. Se describe el gasificador con precalentamiento de aire que se toma como caso de estudio para este trabajo.

CAPÍTULO 4

RÉGIMEN ESTACIONARIO

En este Capítulo, se aplican las nociones del enfoque de modelado eficiente (Badillo-Hernandez et al., 2019) al modelo en EADs (3.7) del gasificador Imbert con precalentamiento de aire, más una calibración en algunos parámetros del sistema (intercambiador de calor y cinética-transporte), con lo cual se obtienen los modelos de orden eficiente: (I) N_{exp} que describe la operación nominal del gasificador dada por los datos experimentales de Yucel y Hastaoglu (2016), y (II) N_S que describe los conjuntos límite del gasificador para la condición nominal de operación. Se reporta que existe multiplicidad de estados estacionarios para la condición nominal de operación, en particular el reactor posee triestabilidad sin evidencia de ciclos límite. Se encuentra un EE de mediana conversión (llamado de rejilla) en el cual es factible operar al reactor, ya que proporciona una producción de gas de síntesis razonable, comparada con la nominal. Finalmente, mediante simulaciones, se valida la naturaleza de los EEs encontrados, determinando que se tienen 3 EEs estables (llamados nominal, de rejilla y de extinción) con 2 EEs inestables (llamados de baja y alta conversión) entre ellos.

4.1. Operación nominal

Para describir de manera eficiente el EE experimental (también llamado nominal) de operación se requiere: (I) realizar una calibración en parámetros de cinética-transporte químicos y del intercambiador de calor, (II) encontrar el modelo de orden N_{exp} que describe el EE nominal, y (III) comparar los resultados obtenidos con modelos de orden N_{exp} y N_{pde} , contra datos experimentales. La reproducción del EE experimental, representa un paso fundamental para la descripción de la dinámica no lineal del gasificador Imbert bajo estudio.

4.1.1. Calibración de parámetros

Mediante el uso del modelo del gasificador en EADs, dado por la ecuación (3.7), con $N = N_{pde} = 240$ (el orden que un resolvidor de EDP convencional utilizaría), se realizaron simulaciones utilizando los valores nominales de flujo reportados en la Tabla 3.1 y considerando temperatura ambiente para los flujos entrantes. Con lo anterior, el vector de

entrada nominal $\bar{\mathbf{d}}$ es

$$\bar{\mathbf{d}} = \left[\bar{Q}_{se}, \bar{Q}_{ge}, \bar{\mathbf{C}}_{se}^T, \bar{\mathbf{C}}_{ge}^T, \bar{T}_{se}, \bar{T}_{ge}, \bar{T}_a \right] \quad (4.1a)$$

donde

$$\bar{Q}_{se} = \frac{\bar{F}_{se}}{\rho_B(1-\varepsilon)} = 2.5373 \times 10^{-6} \left[\frac{\text{m}^3}{\text{s}} \right] \quad (4.1b)$$

$$\bar{Q}_{ge} = \frac{\bar{F}_{se} W_{ab}}{\rho_a} = 9.7963 \times 10^{-4} \left[\frac{\text{m}^3}{\text{s}} \right] \quad (4.1c)$$

$$\bar{\mathbf{C}}_{se} = \left[\rho_B(1-\varepsilon)(1-\bar{M}/100) \ 0 \ \rho_B(1-\varepsilon)(\bar{M}/100) \right]^T \left[\frac{\text{kg}}{\text{m}^3} \right] \quad (4.1d)$$

$$\bar{\mathbf{C}}_{ge} = [X_{O_2} \ X_{H_2} \ X_{CO} \ X_{CO_2} \ X_{CH_4} \ X_{H_2O} \ X_T \ X_{N_2}] \ [\% \text{mol}]^T$$

$$\bar{\mathbf{C}}_{ge} = [20.95 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 79.05]^T \ [\% \text{mol}] \quad (4.1e)$$

$$\bar{T}_{se} = \bar{T}_{ge} = \bar{T}_a = 300 \text{ [K]} \quad (4.1f)$$

Utilizando los parámetros de cinética-transporte para chips de madera reportados en trabajos previos (Tabla A.1) (Yucel y Hastaoglu, 2016; Di Blasi, 2000; Di Blasi y Branca, 2013), se encontró que la descripción del EE nominal no resultaba adecuada, ya que: (I) la composición del gas de síntesis a la salida del reactor estaba fuera de rango experimental para H_2 , CO y CH_4 , (II) el perfil de temperatura dentro del reactor se encontraba por debajo de las mediciones en $Z_2 - Z_5$ y por arriba en Z_7 , y (III) las temperaturas del aire precalentado y del gas de síntesis (después de pasar por el intercambiador de calor), estaban fuera de los rangos reportados por el fabricante.

Debido a lo anterior, se realizó un ajuste en los parámetros reportados en la Tabla 4.1, los cuales corresponden con las energías de activación de pirólisis (E_2), oxidación de hidrógeno (E_7) y oxidación de carbonizado (E_9), con la calibración de estos parámetros se consiguió que la composición del gas de síntesis al fondo del reactor y el perfil de temperatura al interior del gasificador, se encontraran dentro de rangos reportados experimentalmente. También se realizó un escalamiento de los coeficientes de transferencia global de energía (definidos en Apéndice A) entre el reactor y el flujo de gas de síntesis en la sección anular (h_{bg}), así como el del gas de síntesis con el ambiente (h_{wa}), tal que

$$\mathbf{h}_{w0} = [h_{bg} \ h_{wa}]_0^T = [0.0434 \ 0.4097]^T \text{ [W/K]}, \quad \mathbf{h}_w = [0.01736 \ 0.006145]^T \text{ [W/K]} \quad (4.2)$$

con lo cual se consiguió que los valores de temperatura del aire precalentado y del gas de síntesis después de pasar por el intercambiador de calor, se encontraran dentro de los rangos reportados experimentalmente. En particular el ajuste redujo la cantidad de CO , incrementó el H_2 y el CH_4 en el gas de síntesis; permitió un mejor ajuste en el perfil de temperatura para la parte más baja del reactor; capturó de manera adecuada el comportamiento del intercambiador de calor, ya que se tenían transferencias hacia dentro del reactor y hacia el ambiente que no correspondían con el comportamiento experimental, obteniendo que la efectividad del intercambiador de calor (ε_{he}) (A.10) sea de 86.63 %.

4.1.2. Orden eficiente N_{exp}

Dado que reproducir los datos experimentales en EE es una tarea relativamente sencilla conociendo los datos de alimentación y los parámetros del sistema, de manera similar a

Tabla 4.1: Parámetros nominales, calibrados y su incertidumbre

Energía de activación [kJ/kmol]	Nominal \mathbf{p}	Calibrado \mathbf{p}_a	Incertidumbre $\tilde{\mathbf{p}}$
E_2	6.28	7.15	± 15
E_7	4.20	3.78	± 7
E_9	1.60	1.76	± 4

como en el Capítulo 3 se presentó la estrategia para calcular los ordenes eficientes del modelo para reproducir conjuntos límite y comportamiento transitorio, a continuación se presentan algunas definiciones para determinar el orden eficiente N_{exp} que describe exclusivamente el EE experimental de interés:

Definición 8 (Error de ajuste entre modelo y datos experimentales).

$$\varepsilon_f^{\bar{x}ex}(\mathbf{p}_a, N_{pde}) := |E_x \bar{\mathbf{x}}(\mathbf{p}_a, N_{pde}) - E_x(\bar{\mathbf{x}})|_{\bar{x}ex} \quad (4.3)$$

donde $E_x \bar{\mathbf{x}}(\mathbf{p}_a, N_{pde})$ representa los valores en EE calculados por el modelo en las ubicaciones para las cuales se tienen mediciones, $E_x(\bar{\mathbf{x}})$ son los datos experimentales disponibles, $|\cdot|_{\bar{x}ex}$ es una norma para cuantificar el error entre datos experimentales y el modelo matemático (definida en Apéndice B).

Definición 9 (Error de ajuste debido a discretización del modelo). Considerando los modelos de orden N que pertenecen al conjunto \mathcal{N}_{pde} (3.14), se tiene:

$$\varepsilon_d^{\bar{x}ex}(N) := |E_x \bar{\mathbf{x}}(\mathbf{p}_a, N) - E_x(\bar{\mathbf{x}})|_{\bar{x}ex} \geq \varepsilon_d^{\bar{x}ex}(N_{pde}), \quad N \in \mathcal{N}_{pde} \quad (4.4)$$

Definición 10 (Orden eficiente N_{exp}). El modelo de orden eficiente N_{exp} que describe al EE nominal del gasificador Imbert (3.1), es el número entero más pequeño para el cual el error de ajuste debido a discretización ($\varepsilon_d^{\bar{x}ex}$) es similar al error de ajuste del modelo ($\varepsilon_f^{\bar{x}ex}$)

$$N_{exp} \ni \varepsilon_d^{\bar{x}ex}(N_{exp}) = \varepsilon_f \approx \varepsilon_f^{\bar{x}ex}(\mathbf{p}_a, N_{pde}), \quad N_{exp} \leq N_S < N_{pde} \quad (4.5a)$$

El orden eficiente N_{exp} para la descripción de un solo EE comparado contra datos experimentales del caso de estudio, es determinado a partir de la Figura 4.1, que se obtiene siguiendo el procedimiento de tres pasos:

- **Paso 1.** Se dibuja la línea de error de ajuste del modelo de orden N_{pde}

$$\mathcal{C}_f^{\bar{x}ex} = \{(N, \varepsilon) \in \Lambda | \varepsilon = \varepsilon_f^{\bar{x}ex}(\mathbf{p}_a, N_{pde})\} \subset \Lambda, \quad N \in \mathcal{N}_{pde} \quad (4.5b)$$

- **Paso 2.** Se dibuja la curva de error de discretización de los modelos de orden N

$$\mathcal{C}_d^{\bar{x}ex} = \{(N, \varepsilon) \in \Lambda | \varepsilon = \varepsilon_d^{\bar{x}ex}(N)\} \subset \Lambda \quad (4.5c)$$

- **Paso 3.** De la intersección entre $\mathcal{C}_d^{\bar{x}ex}$ (4.5b) y $\mathcal{C}_f^{\bar{x}ex}$ (4.5c) se determina el orden eficiente N_{exp}

Aplicando las definiciones anteriores en el caso de estudio, se tiene que el error de ajuste del modelo de orden N_{pde} es $\varepsilon_f^{\bar{x}ex} = 8.346\%$, el cual determina la línea recta horizontal de la Figura 4.1, cuya primera intersección (de izquierda a derecha) con la curva $\mathcal{C}_d^{\bar{x}ex}$ se da aproximadamente para $\varepsilon_d^{\bar{x}ex} = 8.264\%$, que está asociado con el modelo de orden $N_{exp} = 21$, que describe al EE nominal experimental de operación de manera similar al modelo de orden N_{pde} .

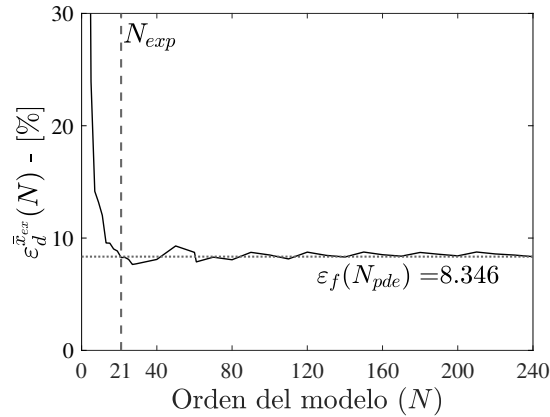


Figura 4.1: Cálculo del orden eficiente N_{exp} para descripción de datos experimentales

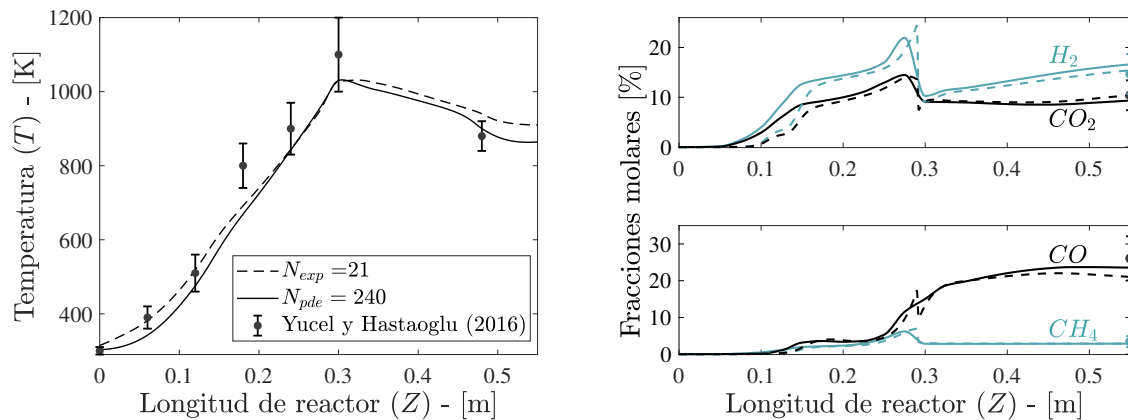


Figura 4.2: Comparación de modelos de orden N_{exp} y N_{pde} contra datos experimentales: perfiles de temperatura (gráfica izquierda) y composición de gas de síntesis (gráfica derecha)

4.1.3. Comparación con datos experimentales

En la Figura 4.2, se presentan los perfiles de temperatura del lecho y de la composición de gas de síntesis obtenidos con los modelos de orden N_{exp} y N_{pde} comparados contra los datos experimentales reportados por Yucel y Hastaoglu (2016). Es posible observar que con ambos modelos se describen adecuadamente los datos de temperatura al interior del reactor y de composición de gas de síntesis al fondo, en particular para las temperaturas, se observa que con el modelo de orden N_{exp} los valores de temperatura del perfil en $0-0.25$ m y $0.32-0.55$ m se incrementan, mientras que de $0.25-0.32$ m no hay diferencias apreciables respecto al modelo de orden N_{pde} .

Para la predicción de la composición del gas de síntesis, se tienen los datos de la Tabla 4.2, donde se presentan los resultados obtenidos por los modelos de orden N_{exp} y N_{pde} , así como los datos experimentales y de modelo reportados por Yucel y Hastaoglu (2016). Se calculó el error relativo entre los datos experimentales y de los modelos (propios y de Yucel y Hastaoglu (2016)), encontrando que para H_2 y CO_2 se mejora la predicción con los modelos de este trabajo, mientras que el modelo de Yucel y Hastaoglu (2016) es más acertado al predecir el contenido de CO . Finalmente, la predicción de CH_4 resulta adecuada con cualquier modelo.

Los modelos presentados describen satisfactoriamente el EE experimental, la diferencia entre ellos radica en la cantidad de ecuaciones que necesitan resolver. El modelo de Yucel

Tabla 4.2: Comparación de gas de síntesis a la salida del reactor: modelos de orden eficiente (MOE) N_{exp} y N_{pde} propios, contra datos experimentales y de modelo de literatura

Especie gaseosa	Fracción molar [%]				Error relativo de modelos [%]		
	Yucel (2016)		MOE		Yucel (2016)		MOE
	Exp.	Modelo	N_{pde}	N_{exp}	N_{pde}	N_{exp}	
H_2	14.71	18.25	15.43	16.61	24.06	4.95	12.93
CO	26.07	25.85	21.03	23.55	0.84	19.29	9.64
CO_2	10.4	7.84	10.41	9.35	24.61	0.15	10.08
CH_4	3.42	2.9	2.87	2.86	15.20	15.98	16.37

y Hastaoglu (2016) posee una discretización de $N = 240$ nodos considerando 13 EDPs, lo cual resulta en 3,120 EDOs; el modelo propuesto en este trabajo, bajo las suposiciones de modelado realizadas, está compuesto de 5 EDPs y 10 EAs, dependiendo del tamaño de la discretización se resuelven: (i) un total de 1,500 EDOs y 2,400 EAs para $N_{pde} = 240$, y (ii) 105 EDOs y 210 EAs para $N_{exp} = 21$. De lo anterior, es posible notar que el número de EDOs que necesita resolver el modelo de orden $N_{exp} = 21$, representa el 3.63% y el 7% del total que a los modelos de Yucel y Hastaoglu (2016) y al propio con $N_{pde} = 240$, respectivamente, les correspondería.

4.2. Multiplicidad de estados estacionarios

Utilizando el modelo (3.7) con los parámetros ajustados (Tabla 4.1 y (4.2)) que describe el EE experimental, en conjunto con la aplicación de la metodología de modelado eficiente (Badillo-Hernandez et al., 2019), en esta sección se analiza la multiplicidad de EEs para esta clase de reactores en condiciones nominales de operación. Se encontró que además del EE nominal (el que todos los autores estudian) se cuenta con 4 EEs adicionales, de los cuales 2 son inestables y 2 estables. La descripción de la multiplicidad de EEs se realiza con un modelo de orden N_S eficiente.

4.2.1. Orden eficiente N_S

La aplicación de los pasos descritos por las ecuaciones (3.20) al modelo (3.7) de orden N , da como resultado el orden eficiente N_S y los conjuntos límite S (3.9):

$$N_S = 61 \quad (4.6a)$$

$$S(\mathbf{p}_a, N_S) = S_S(\mathbf{p}_a, N_S) = \{\bar{\mathbf{x}}_E, \bar{\mathbf{x}}_L^u, \bar{\mathbf{x}}_G, \bar{\mathbf{x}}_H^u, \bar{\mathbf{x}}\}, \quad S_l(\mathbf{p}_a, N_S) = \emptyset \quad (4.6b)$$

que se obtienen de la intersección entre la curva de discretización \mathcal{C}_d^S (3.20b) con la recta de error paramétrico \mathcal{C}_p^S (3.20a) (Figura 4.3)

$$(N_S, \varepsilon_d^S) = \mathcal{C}_d^S \cap \mathcal{C}_p^S = (61, 8.190 \times 10^{-3}) \subset \Lambda \quad (4.6c)$$

$$N_S = 61 > N^- = 55 \quad (4.6d)$$

Debido a que no se hallaron ciclos límite ($S_l = \emptyset$), el conjunto S_S de EEs es igual al conjunto límite S . El orden de confiabilidad N^- es el límite inferior del intervalo \mathcal{N} (3.16) donde el conjunto límite S posee la misma topología (número de EEs y estabilidad).

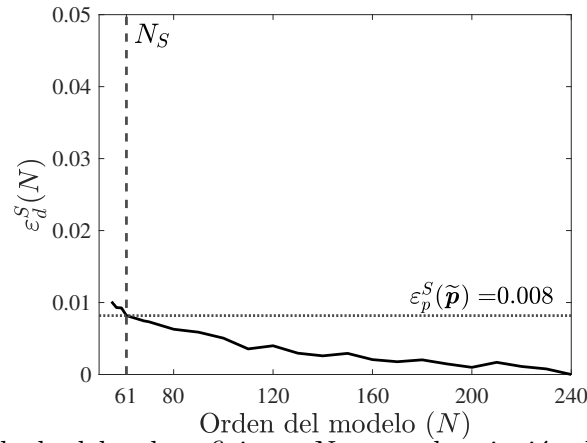


Figura 4.3: Cálculo del orden eficiente N_S para descripción de conjuntos límite

Tabla 4.3: 5 EEs en la operación nominal

3 EEs estables	
$\bar{\mathbf{x}}_E$	(E) extinción (nula conversión)
$\bar{\mathbf{x}}_G$	(G) ignición desplazado a la rejilla (mediana conversión)
$\bar{\mathbf{x}}$	(I) ignición nominal (máxima conversión)
2 EEs inestables	
$\bar{\mathbf{x}}_L^u$	(L) silla entre $\bar{\mathbf{x}}_E$ y $\bar{\mathbf{x}}_G$ (baja conversión)
$\bar{\mathbf{x}}_H^u$	(H) silla entre $\bar{\mathbf{x}}_G$ y $\bar{\mathbf{x}}$ (alta conversión)

De acuerdo a la ecuación (4.6b), bajo condiciones nominales de operación el gasificador Imbert con precalentamiento de aire tiene 5 EEs, de los cuales 3 son estables (triestable) y 2 inestables, son etiquetados como se muestra en la Tabla 4.3. Para los EEs estables, se tiene un estado que de aquí en adelante se llamará *de rejilla* ($\bar{\mathbf{x}}_G$), cuyo nombre es heredado de reportes en trabajos previos para gasificadores estratificados (Di Blasi, 2000; Milligan, 1994; T. B. Reed y Markson, 1985) e Imbert (Simone et al., 2013), donde reportan un comportamiento atípico en el cual el perfil de temperatura se estabiliza *hacia la rejilla*, lo anterior fue hallado numéricamente cuando realizaron un análisis bajo condiciones de operación extremas de flujo de aire y contenido de humedad en la biomasa, sin poseer nociones de multiplicidad de EEs. Los EEs de extinción ($\bar{\mathbf{x}}_E$) y de operación nominal ($\bar{\mathbf{x}}$), corresponden con el caso donde no hay conversión de energía y cuando se lleva a cabo como especifica el fabricante, respectivamente. Para los EEs inestables de alta ($\bar{\mathbf{x}}_H^u$) y baja ($\bar{\mathbf{x}}_L^u$) conversión, es la primera vez que se reportan, ya que por su naturaleza resulta imposible alcanzarlos experimentalmente y con el enfoque seguido en la literatura (centrado en la descripción de la operación nominal), tampoco se había investigado su existencia de forma numérica.

4.2.2. Comparación entre EEs en condiciones nominales

En las Figuras 4.4, 4.5 y en la Tabla 4.4 se presenta la comparación entre los perfiles de las variables del modelo y de la composición del gas de síntesis en EE con condiciones nominales de operación, respectivamente. Para el perfil de temperatura del EE de rejilla

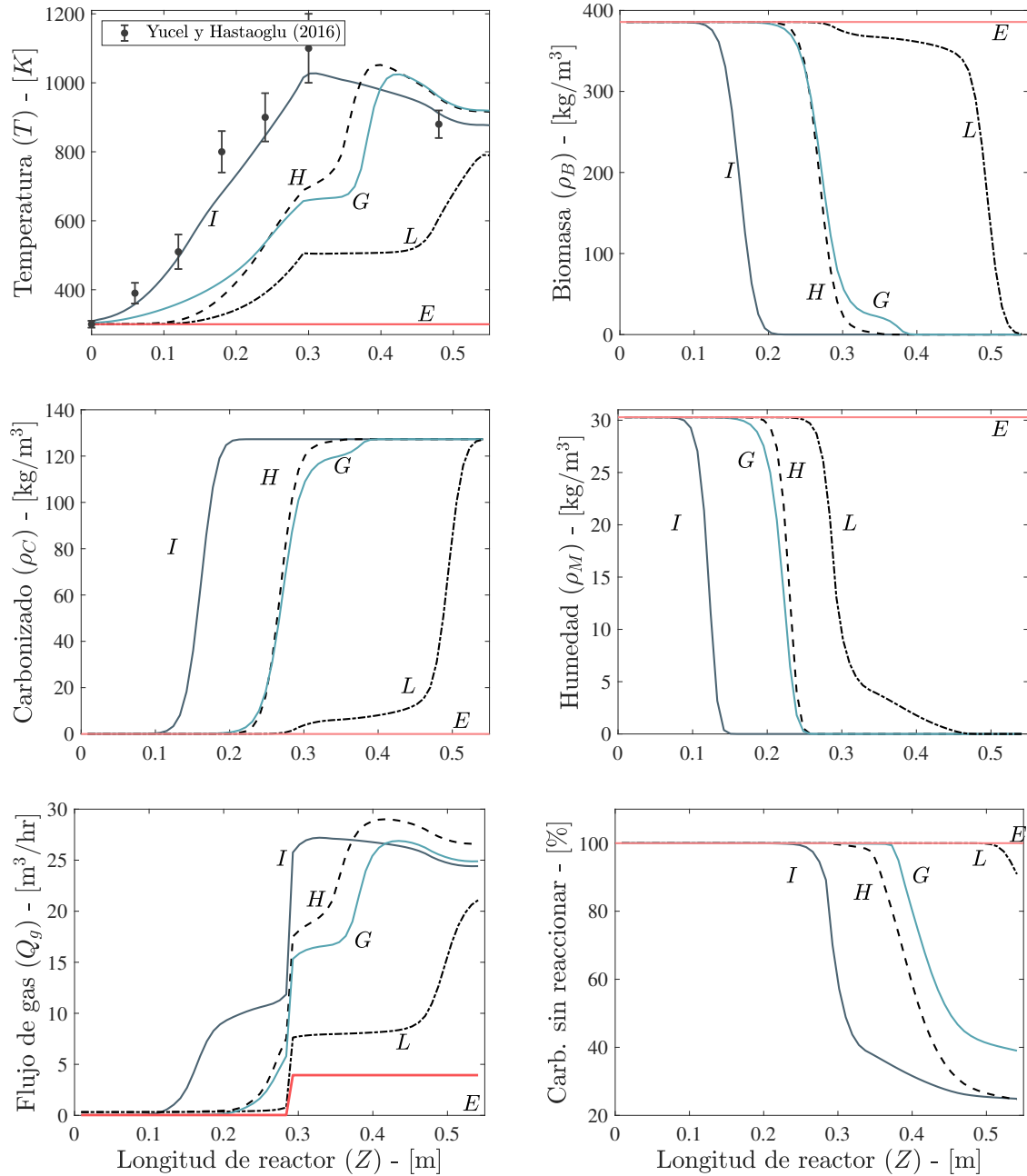


Figura 4.4: Conjunto de perfiles en EE con condiciones nominales de operación: Temperatura, componentes sólidas y flujo de gas

(\bar{x}_G), es posible observar que el punto más caliente (*hotspot*) se desplaza hacia la rejilla unos 0.12 m respecto al EE nominal (\bar{x}) con diferencia en temperatura despreciable (de unos 3 K), mientras que el incremento en el perfil se lleva a cabo en dos pasos, el primero para los primeros 0.3 m y el segundo de 0.38 – 0.42 m, posterior a esto el perfil decrece; para el EE nominal (\bar{x}) se tiene que el crecimiento del perfil de temperatura se da desde la cima hasta 0.3 m, posteriormente el perfil de temperatura decrece por debajo del perfil del EE de rejilla (\bar{x}_G) con unos 40 K de diferencia. Para los perfiles de temperatura de los EEs inestables, se tiene que el EE alto (\bar{x}_H^u) es muy parecido al perfil del EE de rejilla (\bar{x}_G), la principal diferencia entre ambos es que el EE inestable alto (\bar{x}_H^u) posee el *hotspot*

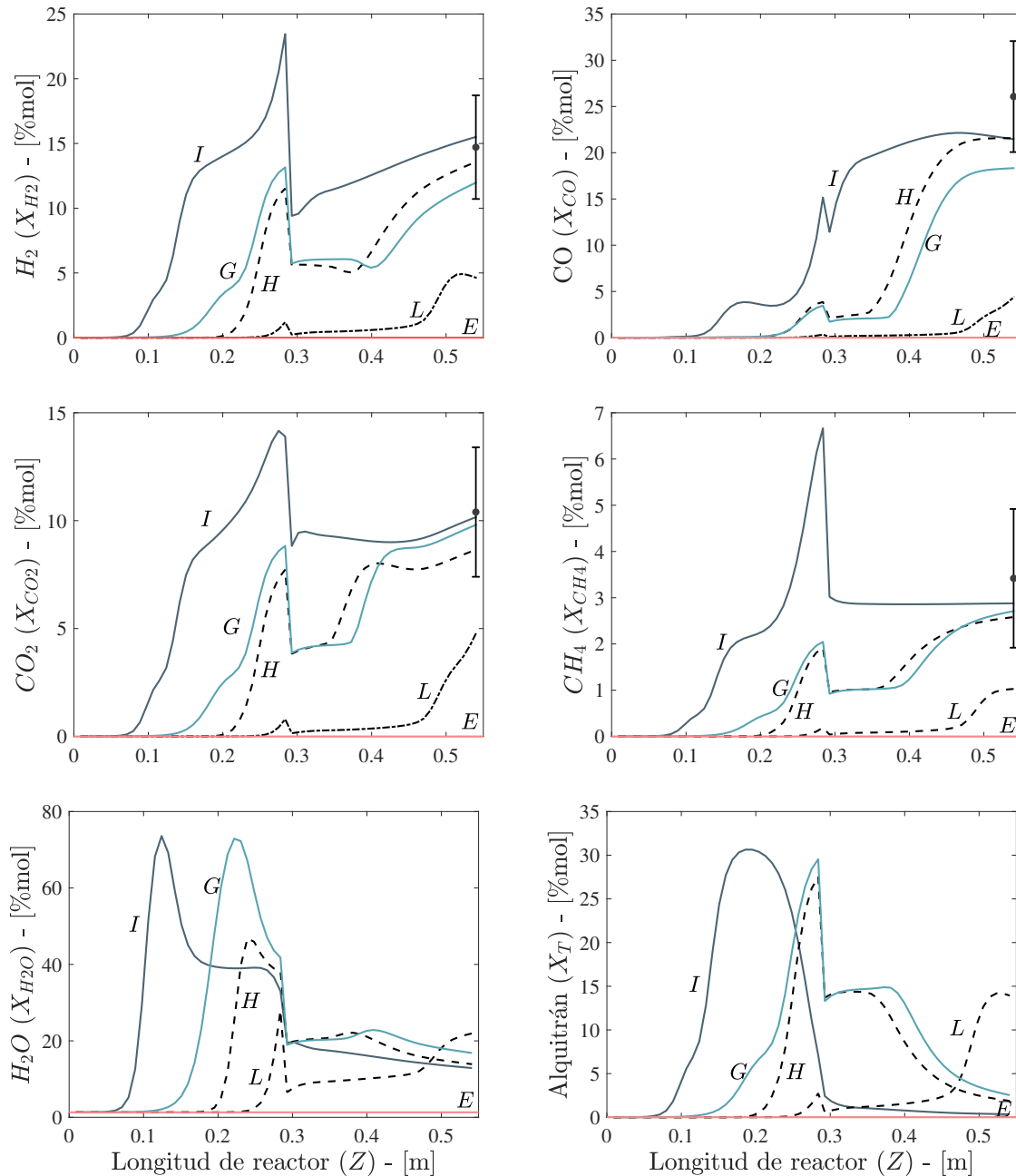


Figura 4.5: Conjunto de perfiles en EE con condiciones nominales de operación: componentes gaseosas

unos 0.05 m hacia arriba; para el perfil de temperatura del EE inestable bajo (\bar{x}_L^u) se puede observar que su incremento da en dos etapas, la primera de 0 – 0.3 m y la segunda desde 0.45 m hasta el fondo del gasificador, alcanzando la mayor temperatura justo en la rejilla (790 K). Para la conversión de biomasa, se observa que para el EE nominal (\bar{x}) se inicia desde 0.1 m, mientras que para el EE de rejilla (\bar{x}_G) comienza en 0.2m, en ambos casos la conversión se da en los 0.1 m siguientes; para los EEs inestables se tiene que el EE alto (\bar{x}_H^u) es muy parecido al EE de rejilla (\bar{x}_G), mientras que en el EE inestable bajo (\bar{x}_L^u) la conversión inicia desde 0.28 m de manera lenta y se acelera a partir de 0.45 m. En términos de la composición del gas de síntesis se observa que el EE nominal (\bar{x}) posee la

Tabla 4.4: Comparación de la composición del gas de síntesis a la salida del reactor para los 5 EEs, utilizando modelo de orden eficiente N_S

Estado estacionario	Fracción molar				ϑ [MJ/m ³]	η_{gf} [%]	
	H_2	CO	CO_2	CH_4			
Nominal ($\bar{\mathbf{x}}$)	15.52	21.46	10.17	2.87	0.34	5.4170	62.45
Alta conversión ($\bar{\mathbf{x}}_H$)	13.59	21.57	8.66	2.58	1.87	5.1175	61.56
De rejilla ($\bar{\mathbf{x}}_G$)	12.00	18.33	9.81	2.71	2.53	4.5835	51.39
Baja conversión ($\bar{\mathbf{x}}_L$)	4.61	4.45	4.84	1.02	13.94	1.4291	15.79
Extinción ($\bar{\mathbf{x}}_E$)	0	0	0	0	0	0	0

mayor fracción molar para H_2 , CO_2 y CH_4 , mientras que para CO el EE inestable alto ($\bar{\mathbf{x}}_H^u$) es el que más produce; en términos del contenido de alquitranes el EE nominal ($\bar{\mathbf{x}}$) es el que menos produce y se incrementa su producción conforme se llega al EE inestable bajo ($\bar{\mathbf{x}}_L^u$). Para el poder calórico inferior del gas de síntesis ϑ (A.8) y la eficiencia del gas frío η_{gf} (A.9), se tienen ligeras diferencias entre los EEs nominal, inestable alto y de rejilla (del 5 a 15%), además que el flujo de gas de síntesis a la salida del reactor en los tres casos también es similar (24.4 m³/h), por lo anterior los EEs de rejilla ($\bar{\mathbf{x}}_G$) y el inestable alto ($\bar{\mathbf{x}}_H^u$) pueden ser adecuados para operar y satisfacer demandas energéticas similares al del EE nominal ($\bar{\mathbf{x}}$) bajo las mismas condiciones de alimentación.

Los resultados presentados representan cualitativamente la descripción de la multiplicidad de EEs del gasificador Imbert para condiciones nominales de operación, la validación de las características específicas de los EEs de rejilla y los inestables va más allá de los alcances de este trabajo.

4.2.3. Trayectorias desde EEs inestables perturbados

Para verificar la triestabilidad hallada en el gasificador Imbert, se plantea generar 4 trayectorias: (I) dos que parten en la vecindad del EE inestable alto $\bar{\mathbf{x}}_H^u$ con destino hacia los EEs estables nominal $\bar{\mathbf{x}}$ y de rejilla $\bar{\mathbf{x}}_G$, y (II) dos que parten en la vecindad del EE inestable bajo $\bar{\mathbf{x}}_L^u$ con destino hacia los EEs estables de rejilla $\bar{\mathbf{x}}_G$ y de extinción $\bar{\mathbf{x}}_E$. Considere las trayectorias

$$\mathbf{x}_i(t) = \tau_{\mathbf{x}}(t, \mathbf{x}_0^i, \bar{\mathbf{d}}, \mathbf{p}_a, N), \quad i = 1, \dots, 4, \quad N = N_S \quad (4.7a)$$

que se generan debido a la entrada nominal $\bar{\mathbf{d}}$, con las condiciones iniciales de los estados dinámicos \mathbf{x}_0^i igual a los EEs inestables alto ($\bar{\mathbf{x}}_L^u$) y bajo ($\bar{\mathbf{x}}_H^u$), con una perturbación en el perfil de temperatura, es decir

$$\mathbf{x}_0^i = [\mathbf{C}_{s,H}^T \ w_i T_H \ T_{h,H}]^T, \quad i = 1, 2 \quad (4.7b)$$

$$\mathbf{x}_0^i = [\mathbf{C}_{s,L}^T \ w_i T_L \ T_{h,L}]^T, \quad i = 3, 4 \quad (4.7c)$$

donde

$$\mathbf{w} = [w_1 \ w_2 \ w_3 \ w_4]^T = [1.02 \ 0.98 \ 1.02 \ 0.98]^T$$

es un vector con los pesos correspondientes para perturbar en $\pm 2\%$ a los perfiles de temperatura en EE.

La descripción eficiente de las cuatro trayectorias (4.7) es una tarea de modelado

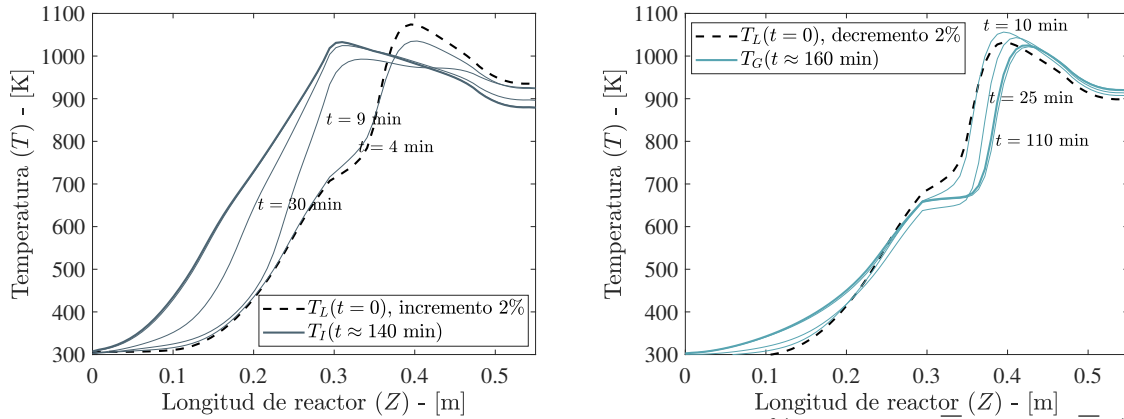


Figura 4.6: Transición del perfil de temperatura desde: 2% arriba de \bar{T}_H hacia \bar{T} (gráfica izquierda) y 2% abajo de \bar{T}_H hacia \bar{T}_G (gráfica derecha)

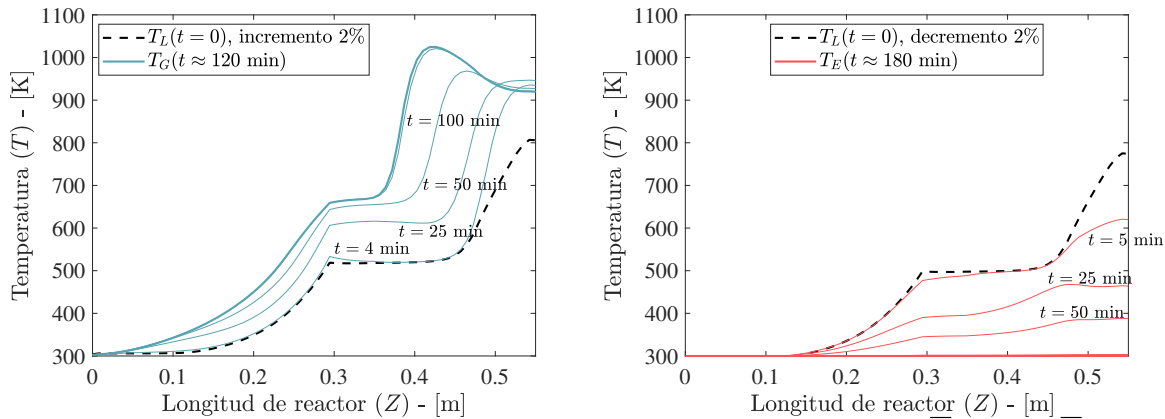


Figura 4.7: Transición del perfil de temperatura desde: 2% arriba de \bar{T}_L hacia \bar{T}_G (gráfica izquierda) y 2% abajo de \bar{T}_L hacia \bar{T}_E (gráfica derecha)

compleja, que en principio requiere de al menos un modelo de orden N_S (de acuerdo a ecuación (3.24)), ya que las trayectorias deben evolucionar sobre cada una de las cuencas de atracción de los tres EEs estables (\bar{x} , \bar{x}_G , \bar{x}_E de la Tabla 4.3). Se considera un modelo de orden $N_S = 61$ para describir las trayectorias (4.7), ya que este análisis sólo es para validar la naturaleza de los EEs en condiciones nominales.

Para las trayectorias que parten cerca del EE inestable alto (\bar{x}_H^u), en la Figura 4.6 se puede observar que al perturbar con +2% las trayectorias de temperatura convergen al EE nominal \bar{x} , mientras que al perturbar con -2% las trayectorias se dirigen al EE de rejilla \bar{x}_G , se percibe que los tiempos de asentamiento son parecidos, siendo más rápida por 20 min la trayectoria hacia el EE nominal respecto a la que se dirige al EE de rejilla. Para el caso de las trayectorias que parten cerca del EE inestable de baja conversión (\bar{x}_L^u), en la Figura 4.7 se observa que para la perturbación de +2% las trayectorias convergen al EE de rejilla \bar{x}_G en 120 min, mientras que para la perturbación de -2% las trayectorias alcanzan el EE de extinción \bar{x}_E en 180 min.

Lo anterior valida numéricamente la naturaleza de los EEs, donde los EEs nominal \bar{x} , de rejilla \bar{x}_G y de extinción \bar{x}_E , que por su naturaleza estable atraen a las trayectorias que caen dentro de su correspondiente cuenca de atracción hacia ellos, mientras que los EEs alto \bar{x}_H^u y bajo \bar{x}_L^u , al ser inestables repelen las trayectorias hacia los EEs estables. En el

Capítulo 6 se determina el orden eficiente N_t para realizar un análisis con mayor detalle del comportamiento transitorio del reactor ante perturbaciones en el flujo de aire y para el arranque.

4.3. Contribuciones del Capítulo

1. El modelo computacional del gasificador Imbert con precalentamiento de aire, describe los datos experimentales en EE disponibles, al calibrar los parámetros del intercambiador de calor del precalentador de aire y de cinética-transporte del reactor.
2. Con un orden $N_{exp} = 21$, se describe los datos experimentales en EE de manera equivalente a la que lo hacen modelos de orden N_{pde} de la literatura (Figura 4.2 y Tabla 4.2).
3. El gasificador Imbert con precalentamiento de aire (bajo condiciones nominales de operación) posee 5 EEs (Figuras 4.4, 4.5 y Tabla 4.4):
 - 3 EEs estables (nominal, de rejilla y de extinción).
 - 2 EEs inestables (de baja y alta conversión).
4. Un modelo de orden eficiente $N_S = 61$, captura la multiplicidad de EEs y fue utilizado para validar la naturaleza de los EEs mediante simulaciones desde la vecindad de los EEs inestables (Figuras 4.6 y 4.7).

CAPÍTULO 5

ANÁLISIS DE BIFURCACIÓN

En este Capítulo se demuestra que, dependiendo del contenido de humedad en la biomasa y/o el flujo de aire suministrado (dentro de rangos normales de variación), el reactor puede exhibir mono, bi o triestabilidad. Se observa que conforme el contenido de humedad en la biomasa se incrementa, la región de triestabilidad también lo hace debido a que la cuenca de atracción del EE de rejilla se incrementa y la del EE nominal disminuye. Lo anterior se sustenta con análisis de bifurcación respecto a contenido de humedad en la biomasa y flujo de aire entrante, con variaciones dentro de rangos normales de operación. El análisis de bifurcación ha sido ampliamente utilizado en la literatura de ingeniería de reactores químicos homogéneos y heterogéneos de uno o dos perfiles para estudiar la multiplicidad de EEs (Heinemann y Poore, 1981; Kuznetsov, 1998; Seydel, 2010). Para el sistema bajo estudio es posible realizar este análisis utilizando el modelo de orden eficiente $N_S = 61$ (obtenido en el Capítulo 4), en combinación con el paquete MATCONTL (Jonkhout, 2019; Bindel, D., Jonkhout C., Govaerts, W., Hughes, J., Kuznetsov, Yu.A., Pekker, M., Veldman, 2019; Govaerts et al., 2011) que realiza la continuación numérica respecto a los parámetros elegidos.

5.1. Bifurcación con respecto al contenido de humedad en la biomasa (CHB)

De acuerdo al fabricante (AllPowerLabs, 2021), el gasificador puede trabajar con biomasa con un contenido de humedad de hasta 30 %, sin embargo recomienda que se trabaje con valores de hasta 20 %, con la finalidad de que se aproveche la energía dentro del reactor y que no se gaste en evaporar el exceso de humedad. Lo anterior se ve complementado con reportes experimentales (Dogru et al., 2002; Soares y Oliveira, 2020; Sarker y Nielsen, 2015) y teórico-experimentales (Jahromi, Rezaei, Hashem Samadi, y Jahromi, 2021; Ong et al., 2015; Hsi et al., 2008) donde se consideran valores de 5 – 15 %.

Los resultados mostrados en el Capítulo 4 corresponden al caso con contenido de humedad en la biomasa (CHB) nominal de 7.28 %, encontrando que el gasificador es triestable. Al ser un parámetro que puede cambiar dependiendo del pretratamiento que se le da a la biomasa, se realizó análisis de bifurcación respecto al CHB M_{se} en el intervalo de 0 – 20,

es decir,

$$\overline{M}_{se} = 7.28 \% \in M = [0, 20] \% \quad (5.1)$$

Dado que el análisis de bifurcación estudia el comportamiento en EE del gasificador, se utiliza el modelo de orden $N_S = 61$ para realizar el análisis con respecto a M_{se} . En la Figura 5.1 se presentan los diagramas de bifurcación respecto a CHB para la temperatura Γ dentro del reactor en una sección posterior a la inyección de aire (en $Z = 0.28\text{m}$) y para el poder calórico inferior ϑ del gas de síntesis effluente, se aprecia que existen dos regiones con distintos tipos de multiplicidad, una con biestabilidad (M_b) y otra con triestabilidad (M_t), separadas por el punto de bifurcación silla-nodo M_{HG}^*

$$M = M_b \cup M_{HG}^* \cup M_t \quad (5.2)$$

En la zona M_b existe *biestabilidad tipo extinción-bajo inestable-nominal* con 3 EEs ($\overline{\mathbf{x}}_E, \overline{\mathbf{x}}$: estables; $\overline{\mathbf{x}}_L^u$: inestable). En el punto de bifurcación M_{HG}^* se tiene la *transición de bi a triestabilidad tipo alto inestable-rejilla* (HG) donde se tienen 4 EEs ($\overline{\mathbf{x}}_E, \overline{\mathbf{x}}$: estables; $\overline{\mathbf{x}}_L^u$: inestable; \mathbf{x}_{HG}^* : bifurcación inestable). Finalmente, en la zona M_t hay *triestabilidad tipo extinción-bajo inestable-rejilla-alto inestable-nominal* con 5 EEs ($\overline{\mathbf{x}}_E, \overline{\mathbf{x}}_G, \overline{\mathbf{x}}$: estables; $\overline{\mathbf{x}}_L^u, \overline{\mathbf{x}}_H^u$: inestables). El EE $\overline{\mathbf{x}}_{HG}^*$ resulta de la unión del par de EEs alto inestable y de rejilla estable ($\overline{\mathbf{x}}_{HG}^* = \overline{\mathbf{x}}_H^u | \overline{\mathbf{x}}_G$), los cuales aparecen (o desaparecen) con el incremento (o decremento) del CHB a través del valor de bifurcación M_{HG}^* . En el intervalo explorado no se encontró evidencia de la existencia de ciclos límite, por lo que $S_l = \emptyset$. Lo anterior se resume en la Tabla 5.1

La Figura 5.1 confirma que para el CHB nominal \overline{M}_{se} se tiene triestabilidad (línea vertical negra gruesa), de igual forma se puede apreciar que la operación nominal es robusta porque se encuentra suficientemente alejada del valor de bifurcación M_{HG}^* . Cuando el CHB se va reduciendo (por debajo de M_{HG}^*), se observa que la cuenca de atracción del EE nominal se incrementa debido a que el punto de bifurcación tipo nodo-silla desaparece, lo cual se traduce en un incremento del rendimiento energético del proceso, ya que se consume menos energía para evaporar el CHB antes de llegar a la zona de combustión. Cuando el CHB se incrementa, si se observa el poder calórico inferior, se aprecia que la cuenca de atracción del EE nominal $\overline{\mathbf{x}}$ se contrae, mientras que para el EE rejilla $\overline{\mathbf{x}}_G$ su cuenca de atracción se incrementa, desde este punto de vista también se puede asegurar que la operación nominal es robusta, debido a que los puntos de bifurcación de creación/destrucción de los EEs alto inestable-nominal y bajo inestable-de rejilla, surgen para CHB superiores al 20 %, valores en los cuales no es recomendado para operar.

Los resultados obtenidos para 0% de CHB son consistentes con el trabajo de Badillo-Hernandez et al. (2019) para un gasificador estratificado que opera con cascarilla de arroz, ya que en ambos casos se manifiesta biestabilidad. La triestabilidad presente en el gasificador Imbert introduce una mayor tolerancia a extinción (respecto al caso biestable) debido a la presencia del EE de rejilla $\overline{\mathbf{x}}_G$, ya que se puede ver como una barrera que evita la extinción y permite al gasificador trabajar de manera aceptable en condiciones nominales, ya que se ha reportado que el poder calórico inferior del gas de síntesis normalmente se encuentra en un rango de 4 – 6[MJ/Nm³] (Li et al., 2019; Maneerung et al., 2018).

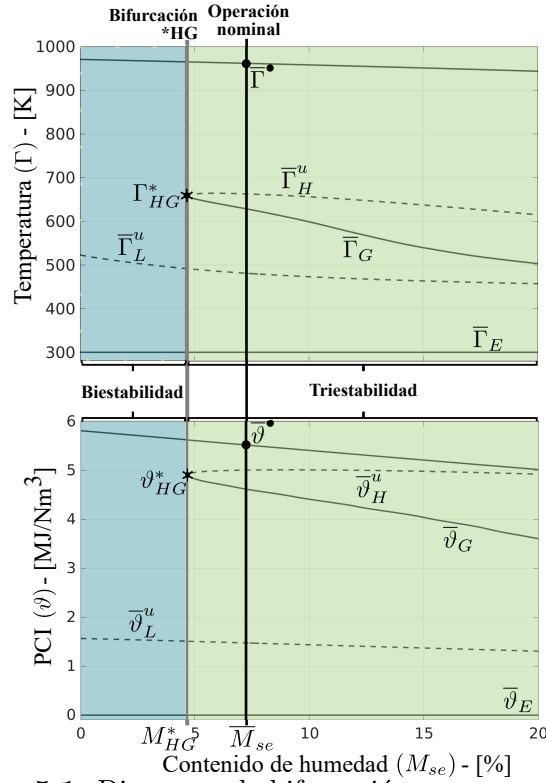


Figura 5.1: Diagrama de bifurcación con respecto CHB

Tabla 5.1: Resultados de análisis de bifurcación con respecto al contenido de humedad

CHB M_{se}	Conjunto S_S de EEs	Tipo de multiestabilidad y de bifurcación
$M_b = [0, 4.6)$	$\{\bar{x}_E, \bar{x}_L^u, \bar{x}\}$	Biestabilidad
$M_{HG}^* = 4.6$	$\{\bar{x}_E, \bar{x}_L^u, \bar{x}_{HG}^*, \bar{x}\}$	Punto de bifurcación *HG
$M_t = (4.6, 20]$	$\{\bar{x}_E, \bar{x}_L^u, \bar{x}_G, \bar{x}_H^u, \bar{x}\}$	Triestabilidad

5.2. Bifurcación con respecto al flujo de aire suministrado (FAS)

El flujo de aire suministrado (FAS) F_{ge} es el grado de libertad más importante, ya que en la operación del reactor se puede modificar de manera relativamente sencilla (mediante un ventilador o incrementando la demanda de gas de síntesis). Considerando el FAS nominal \bar{F}_{ge} reportado por Yucl y Hastaoglu (2016) en el intervalo F

$$\bar{F}_{ge} = 4.56 \text{ [kg/h]} \in F = [0, 6] \quad (5.3)$$

se realiza análisis de bifurcación respecto a F_{ge} al modelo del gasificador de orden $N_S = 61$, considerando contenido de humedad nominal $\bar{M} = 7.28\%$. Con lo anterior, se obtienen los diagramas mostrados en la Figura 5.2 para la temperatura Γ dentro del reactor en una sección posterior a la inyección de aire (en $Z = 0.28\text{m}$) y para el poder calórico inferior ϑ del gas de síntesis efluente, se observa que se tienen 4 regiones con distinto tipo de multiplicidad, separadas por 3 puntos de bifurcación silla-nodo:

$$F = F_m \cup F_{HI}^* \cup F_b^H \cup F_{LG}^* \cup F_t \cup F_{HG}^* \cup F_b^L \quad (5.4)$$

Tabla 5.2: Resultados de análisis de bifurcación con respecto al flujo de aire

FAS F_{ge}	Conjunto S_S de EEs	Tipo de multiestabilidad y de bifurcación
$F_m = [0, 1.17)$	$\{\bar{\mathbf{x}}_E\}$	Monoestabilidad
$F_{HI}^* = 1.17$	$\{\bar{\mathbf{x}}_E, \mathbf{x}_{HN}^*\}$	Punto de bifurcación *HI
$F_b^H = (1.7, 1.87)$	$\{\bar{\mathbf{x}}_E, \bar{\mathbf{x}}_H^u, \bar{\mathbf{x}}\}$	Biestabilidad H
$F_{LG}^* = 1.87$	$\{\bar{\mathbf{x}}_E, \mathbf{x}_{LG}^*, \bar{\mathbf{x}}_H^u, \bar{\mathbf{x}}\}$	Punto de bifurcación *LG
$F_t = (1.87, 5.7)$	$\{\bar{\mathbf{x}}_E, \bar{\mathbf{x}}_L^u, \bar{\mathbf{x}}_G, \bar{\mathbf{x}}_H^u, \bar{\mathbf{x}}\}$	Triestabilidad
$F_{HG}^* = 5.7$	$\{\bar{\mathbf{x}}_E, \bar{\mathbf{x}}_L^u, \mathbf{x}_{HG}^*, \bar{\mathbf{x}}\}$	Punto de bifurcación *HG
$F_b^L = (5.7, 6]$	$\{\bar{\mathbf{x}}_E, \bar{\mathbf{x}}_L^u, \bar{\mathbf{x}}\}$	Biestabilidad L

En la zona F_m se tiene monoestabilidad con el EE estable de extinción $\bar{\mathbf{x}}_E$. Para el valor del punto de bifurcación F_{HI}^* se tiene la *transición de mono a biestabilidad tipo alto inestable-nominal* (HI) donde se tienen 2 EEs ($\bar{\mathbf{x}}_E$: estable; \mathbf{x}_{HI}^* : bifurcación inestable). En la zona F_b^H se tiene *biestabilidad tipo extinción-alto inestable-nominal* (H) con 3 EEs ($\bar{\mathbf{x}}_E, \bar{\mathbf{x}}$: estables; $\bar{\mathbf{x}}_H^u$: inestable). Para el valor del punto de bifurcación F_{LG}^* se tiene la *transición de bi a triestabilidad tipo bajo inestable-de rejilla* (LG) se tienen 4 EEs ($\bar{\mathbf{x}}_E, \bar{\mathbf{x}}_G$: estables; $\bar{\mathbf{x}}_H^u$: inestable; \mathbf{x}_{LG}^* : bifurcación inestable). En la zona F_t se tiene *triestabilidad tipo extinción-bajo inestable-rejilla-alto inestable-nominal* con 5 EEs ($\bar{\mathbf{x}}_E, \bar{\mathbf{x}}_G, \bar{\mathbf{x}}$: estables; $\bar{\mathbf{x}}_L^u, \bar{\mathbf{x}}_H^u$: inestables). Para el valor del punto de bifurcación F_{HG}^* se tiene la *transición de tri a biestabilidad tipo alto inestable-de rejilla* (HG) con 4 EEs ($\bar{\mathbf{x}}_E, \bar{\mathbf{x}}$: estables; $\bar{\mathbf{x}}_L^u$: inestable; \mathbf{x}_{HG}^* : bifurcación inestable). Finalmente, en la zona F_b^L se tiene *biestabilidad tipo extinción-bajo inestable-nominal* (L) con 3 EEs ($\bar{\mathbf{x}}_E, \bar{\mathbf{x}}$: estables; $\bar{\mathbf{x}}_L^u$: inestable).

El EE $\bar{\mathbf{x}}_{HI}^*$ resulta de la unión del par de EEs alto inestable y nominal estable ($\bar{\mathbf{x}}_{HI}^* = \bar{\mathbf{x}}_H^u | \bar{\mathbf{x}}$), los cuales aparecen (o desaparecen) con el incremento (o decremento) del FAS a través del valor de bifurcación F_{HN}^* . El EE $\bar{\mathbf{x}}_{LG}^*$ resulta de la unión del par de EEs bajo inestable y de rejilla estable ($\bar{\mathbf{x}}_{LG}^* = \bar{\mathbf{x}}_L^u | \bar{\mathbf{x}}_G$), los cuales aparecen (o desaparecen) con el incremento (o decremento) del FAS a través del valor de bifurcación F_{LG}^* . El EE $\bar{\mathbf{x}}_{HG}^*$ resulta de la unión del par de EEs alto inestable y de rejilla estable ($\bar{\mathbf{x}}_{HG}^* = \bar{\mathbf{x}}_H^u | \bar{\mathbf{x}}_G$), los cuales aparecen (o desaparecen) con el incremento (o decremento) del FAS a través del valor de bifurcación F_{HG}^* . Al igual que en el análisis respecto a CHB, para este caso tampoco se encontró evidencia de la existencia de ciclos límite, por lo que $S_l = \emptyset$. Lo anterior se resume en la Tabla 5.2.

De acuerdo a la Figura 5.2: (i) el EE nominal $\bar{\mathbf{x}}$ es robusto respecto al FAS, debido a que se encuentra lo suficientemente por arriba del valor de bifurcación F_{HI}^* , ya que se requiere de una disminución del 74% (respecto al valor nominal) para llegar al punto de bifurcación, y (ii) el EE de rejilla $\bar{\mathbf{x}}_G$ es robusto respecto al FAS, debido a que se encuentra lo suficientemente por arriba (o por abajo) del valor de bifurcación F_{LG}^* (o F_{HG}^*).

Los valores de los puntos de bifurcación en el FAS, representan los valores extremos para los cuales se tendrá un cambio en el comportamiento de las trayectorias, siempre y cuando los flujos se mantengan para todo tiempo futuro. En el Capítulo 6 se utilizará este conocimiento para determinar el comportamiento transitorio del sistema cuando se disminuye (o incrementa) el FAS por un tiempo finito.

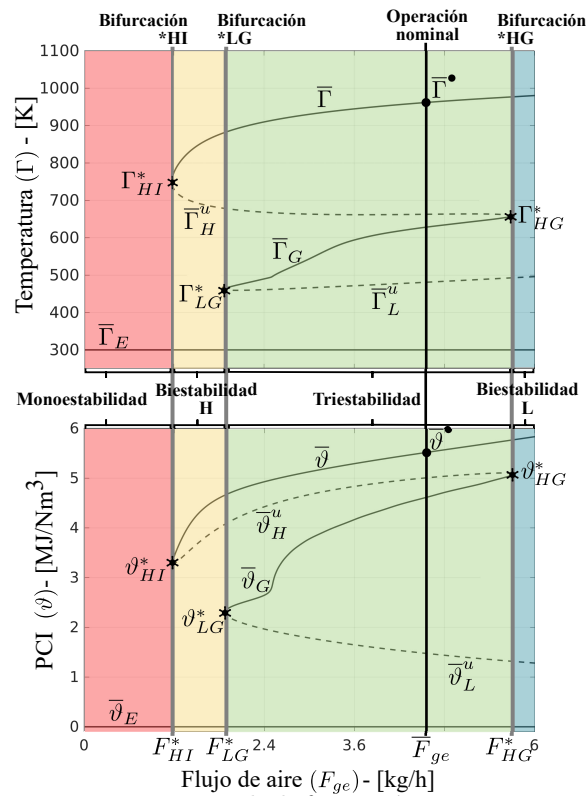


Figura 5.2: Diagrama de bifurcación con respecto a FAS

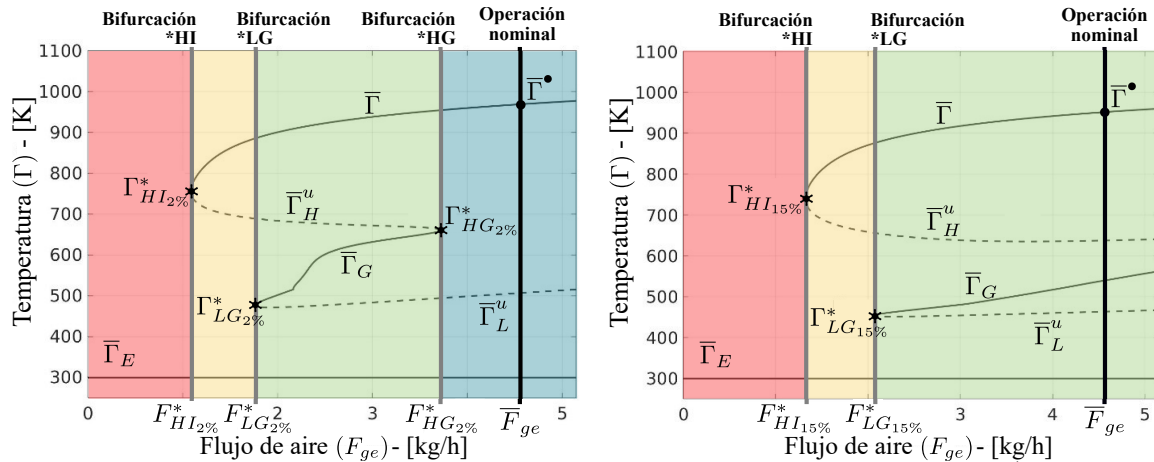


Figura 5.3: Diagramas de bifurcación con respecto a FAS. Comparación para 2 (gráfica izquierda) y 15% (gráfica derecha) de CHB

5.2.1. Casos con bajo y alto contenido de humedad

Como se ha mostrado con los análisis previos, el tipo de multiplicidad presente en el reactor se modifica en función del CHB y del FAS, en esta última sección del Capítulo se muestran los resultados obtenidos al considerar dos valores de humedad (por debajo y arriba del valor nominal) y considerando como parámetro de bifurcación a F_{ge} .

En la Figura 5.3 se presentan los diagramas de bifurcación respecto a FAS para la temperatura Γ dentro del reactor en una sección posterior a la inyección de aire ($Z = 0.28\text{m}$), considerando bajo (2%, gráfica izquierda) y alto (15%, gráfica derecha) CHB. Para el caso con 2% de CHB se tiene que: (I) para el FAS nominal \bar{F} el gasificador es biestable, (II) el

punto de bifurcación $F_{HG_2\%}^*$ posee un valor menor al FAS nominal \bar{F} , y (III) los puntos de bifurcación $F_{HI_2\%}^*$ y $F_{LG_2\%}^*$, comparados con el diagrama de bifurcación de la Figura 5.2, se desplazan hacia la izquierda, lo cual incrementa la robustez del EE nominal \bar{x} bajo condiciones nominales de FAS. Para el caso con 15% de CHB se observa que: (i) para el FAS nominal \bar{F} el gasificador es triestable, (ii) el punto de bifurcación $F_{HG_{15\%}}^*$ se desplaza a la derecha por arriba del valor mostrado en la Figura 5.2, quedando más allá del rango para el cual se dibujan las figuras, y (iii) los puntos de bifurcación $F_{HI_{15\%}}^*$ y $F_{LG_{15\%}}^*$, comparados con el diagrama de bifurcación de la Figura 5.2 y el caso con 2% de CHB, se desplazan hacia la derecha, lo cual reduce la robustez del EE nominal \bar{x} bajo condiciones nominales de FAS. Lo anterior implica que la región F_t se reduce (o incrementa) para 2% (o 15%) contenido de humedad, lo cual incrementa (o reduce) la cuenca de atracción del EE nominal \bar{x} .

Los resultados mostrados en este Capítulo explican los hallazgos de Di Blasi (2000) y Simone et al. (2013) para reactores estratificados e Imbert, respectivamente, quienes reportan un EE desplazado hacia la rejilla en el cual observan que la calidad del gas de síntesis es muy pobre como para ser aprovechada y que la temperatura alcanza valores máximos de 873 K al fondo del reactor. El EE que describen corresponde al de rejilla \bar{x}_G con muy alto CHB (30 – 40%) y un flujo elevado de biomasa-aire (incremento del 20 – 25%), como consecuencia de esas condiciones de operación el gas de síntesis no es aprovechable y operar en ese EE no es recomendable. Sin embargo, para condiciones nominales de FAS y CHB, el EE de rejilla \bar{x}_G se podría considerar para operar, ya que posee características similares al EE nominal \bar{x} .

5.3. Contribuciones del capítulo

1. El análisis de bifurcación con respecto a CHB muestra que el gasificador puede ser bi o triestable. Para CHB por debajo del 4.6% el gasificador es biestable, conforme se incrementa el CHB se vuelve triestable (surgen el EE de rejilla y el EE de alta conversión), además que el poder calórico inferior del gas de síntesis y la cuenca de atracción del EE nominal disminuyen (Figura 5.1).
2. El CHB nominal (7.28%) es adecuado, ya que se encuentra lo suficientemente alejado del valor de bifurcación (más allá del dominio presentado en la Figura 5.1) que puede causar que el EE nominal desaparezca.
3. El análisis de bifurcación con respecto al FAS muestra que el gasificador puede ser mono, bi o triestable (Figura 5.2).
4. El EE nominal con valor de FAS nominal (y CHB nominal) es robusto ante cambios en el FAS, ya que se requiere de una disminución del 74% para poder modificar la operación del reactor (Figura 5.2).
5. El análisis de bifurcación con respecto al FAS para bajo y alto CHB, demuestra que la región de triestabilidad se incrementa conforme el CHB también lo hace (Figura 5.3), debido a que la cuenca de atracción del EE de rejilla se incrementa y la del EE nominal se reduce.
6. Los resultados obtenidos son consistentes con los reportados para un gasificador estratificado biestable que opera con 0% de CHB (Badillo-Hernandez et al., 2019).

CAPÍTULO 6

RÉGIMEN TRANSITORIO

En este Capítulo se calcula el orden N_t del modelo, con el cual se describe el comportamiento transitorio y los conjuntos límite del gasificador. Se analiza la respuesta a perturbaciones tipo pulso en el flujo de aire suministrado al operar en el EE nominal, cuyas magnitudes se obtienen de los diagramas de bifurcación con respecto al aire suministrado mostradas en el Capítulo 5 y en combinación con la duración del pulso, se observan trayectorias que: (I) regresan al EE nominal, (II) transitan hacia el EE de rejilla, o (III) se dirigen hacia el EE de extinción. Después, al considerar que el reactor se encuentra en el EE de rejilla con condiciones de operación nominales, se muestra que mediante un pulso que incrementa el flujo de aire es posible generar una trayectoria que lleve al gasificador a operar en el EE nominal, la magnitud mínima del pulso se determina de los diagramas de bifurcación respecto a flujo de aire presentados en el Capítulo 5. Finalmente, se presentan algunas simulaciones de arranque del reactor y se demuestra que dependiendo de las características del perfil de temperatura inicial, la trayectoria de arranque puede converger al EE nominal, al EE de rejilla o regresar al EE de extinción (no enciende).

6.1. Modelado del comportamiento transitorio

En el Capítulo 4 se presentaron las trayectorias que surgen de perturbar los EEs inestables alto y bajo, con la finalidad de mostrar cualitativamente la naturaleza de los EEs, tarea para la cual el modelo de orden $N_S = 61$ resultaba adecuado. En este Capítulo se analizan trayectorias que evolucionan en un dominio más amplio del espacio de estados, para lo cual se requiere un modelo de orden eficiente $N_t > N_S$. Una vez que se obtiene el orden eficiente, se procederá a analizar el arranque del gasificador en la sección 6.3.

6.1.1. Trayectorias de referencia

De los diagramas de bifurcación mostrados en la Figura 5.2, se sabe que si se disminuye el flujo de aire suministrado (FAS) por debajo del punto de bifurcación F_{HI}^* , después de un cierto tiempo las trayectorias del sistema convergen al EE de extinción, sin embargo los diagramas de bifurcación sólo describen los EEs y no brindan información del comportamiento transitorio de las trayectorias que pueden llevar de un EE a otro. Para obtener

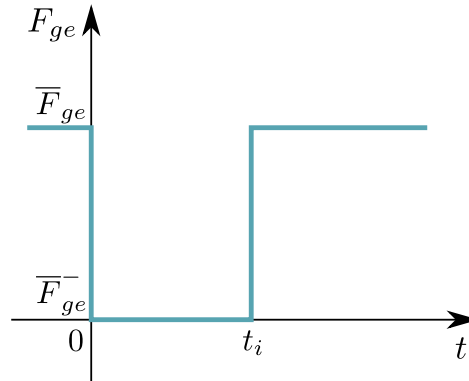


Figura 6.1: Perturbación tipo pulso en el FAS (disminución)

un modelo de orden eficiente N_t que describa el comportamiento transitorio del gasificador, se consideran como trayectorias de referencia la respuesta del EE nominal $\bar{\mathbf{x}}$ ante un decremento en el FAS (Figura 6.1) por dos periodos de tiempo finitos (pulsos cuadrados) para después restablecer el FAS a su valor nominal, es decir

$$\Xi(\mathbf{p}_a, N_{pde}, t) = \{\mathbf{x}_1(t), \mathbf{x}_2(t)\} \quad (6.1a)$$

donde

$$\mathbf{x}_1(t) = \tau_{\mathbf{x}}(t, \mathbf{x}_{10}, \mathbf{d}_1(t), \mathbf{p}_a, N_{pde}) \rightarrow \bar{\mathbf{x}}, \quad \mathbf{x}_{10} = \bar{\mathbf{x}}, \quad \mathbf{d}_1 = [F_{ge1}, \bar{\mathbf{d}}_C^T]^T \quad (6.1b)$$

$$\mathbf{x}_2(t) = \tau_{\mathbf{x}}(t, \mathbf{x}_{20}, \mathbf{d}_2(t), \mathbf{p}_a, N_{pde}) \rightarrow \bar{\mathbf{x}}_G, \quad \mathbf{x}_{20} = \bar{\mathbf{x}}, \quad \mathbf{d}_2 = [F_{ge2}, \bar{\mathbf{d}}_C^T]^T \quad (6.1c)$$

$$F_{gei} = \begin{cases} \bar{F}_{ge}^- & \text{si } t \in [0, t_i) \\ \bar{F}_{ge} & \text{si } t \geq t_i \end{cases} \quad (6.1d)$$

$$(\bar{F}_{ge}^-, \bar{F}_{ge}) = (0, 4.56) \text{ [kg/h]}, \quad t_1 = 5 \text{ min}, \quad t_2 = 25 \text{ min}$$

\mathbf{d}_i es el vector de entrada que genera la i -ésima trayectoria, F_{gei} es el FAS dado por el pulso mostrado en la Figura 6.1, $\bar{\mathbf{d}}_C$ es el vector de entrada nominal $\bar{\mathbf{d}}$ retirando el término asociado al FAS, t_i es la duración del pulso de aire asociado a la i -ésima trayectoria. Las trayectorias (6.1) debidas a los pulsos con ausencia total de aire ($\bar{F}_{ge}^- = 0$), se comportan de la siguiente manera: (I) para $\mathbf{x}_1(t)$ regresan al EE nominal $\bar{\mathbf{x}}$, ya que las trayectorias permanecen en su cuenca de atracción debido a la corta duración del pulso, y (II) para $\mathbf{x}_2(t)$ convergen al EE de rejilla $\bar{\mathbf{x}}_G$, lo cual no resultaba un comportamiento predecible sólo de analizar el diagrama de bifurcación, pero que se explica debido a que las trayectorias caen en la cuenca de atracción del EE de rejilla, evitando así al EE de extinción a pesar de la perturbación.

Este conjunto de trayectorias representa una prueba de modelado severa, debido a la naturaleza de las perturbaciones consideradas, pulsos cuadrados decrementales que implican retirar totalmente el flujo de aire durante ciertos periodos de tiempo, los cuales provocan que las trayectorias: (I) exhiban un desplazamiento significativo del *hotspot*, (II) sean lo suficientemente distintas entre sí, y (III) muestren una evolución a lo largo del espacio de estados.

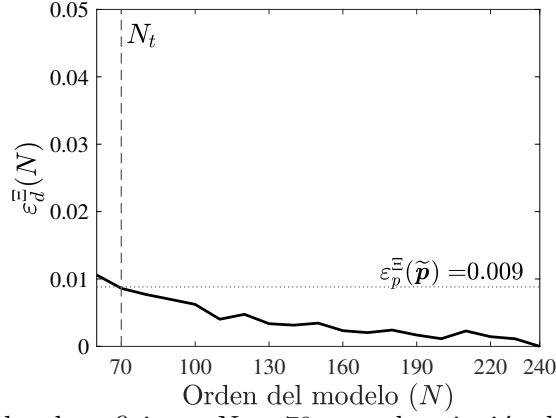


Figura 6.2: Cálculo del orden eficiente $N_t = 70$ para descripción de conjuntos límite y comportamiento transitorio

6.1.2. Orden eficiente N_t

La aplicación de los pasos descritos por las ecuaciones (3.24) al modelo (3.7) de orden N , considerando las trayectorias de referencia (6.1), da como resultado el orden eficiente N_t :

$$N_t = 70 > N_S = 61 > N^- = 55 \quad (6.2a)$$

que describe los conjuntos límite y el comportamiento transitorio del gasificador, que se obtiene con la intersección de la curva de discretización \mathcal{C}_d^E (3.24b) con la recta de error paramétrico \mathcal{C}_p^E (3.24a) en el plano orden-tamaño de error Λ , como se muestra en la Figura 6.2

$$(N_t, \varepsilon_d^E) = \mathcal{C}_d^E \cap \mathcal{C}_p^E = (70, 7.41995 \times 10^{-3}) \subset \Lambda \quad (6.2b)$$

6.2. Robustez ante perturbaciones en flujo de aire

En esta sección se presenta el comportamiento transitorio inducido por las trayectorias (6.1), lo cual se puede considerar una prueba numérica de robustez del EE nominal. Posteriormente, se realiza un análisis similar para el EE de rejilla, al cual se le aplica un pulso de aire incrementando el FAS con la finalidad de llevar las trayectorias al EE nominal.

6.2.1. Pulsos de aire aplicados en EE nominal

Considerando el modelo de orden eficiente $N_t = 70$, se obtiene la Figura 6.3 que muestra la evolución temporal de los perfiles de temperatura, hidrógeno y alquitranes para la trayectoria $\mathbf{x}_1(t)$, en la cual las trayectorias regresan al EE nominal, observando que: (I) una buena parte del perfil de temperatura decrece, lo cual produce que el *hotspot* baje 90 K y se desplace 0.09 m hacia el fondo del reactor mientras se aplica el pulso, para posteriormente regresar al EE nominal sin sobrepasos y con un tiempo de asentamiento de 35 min, y (II) para la fracción molar de los gases, se observa que las trayectorias regresan al EE 20 min antes que el perfil de temperatura, teniendo cambios significativos principalmente desde 0.3 – 0.5 m.

La trayectoria $\mathbf{x}_2(t)$ se muestra en la Figura 6.4, se observa que: (I) el *hotspot* del perfil

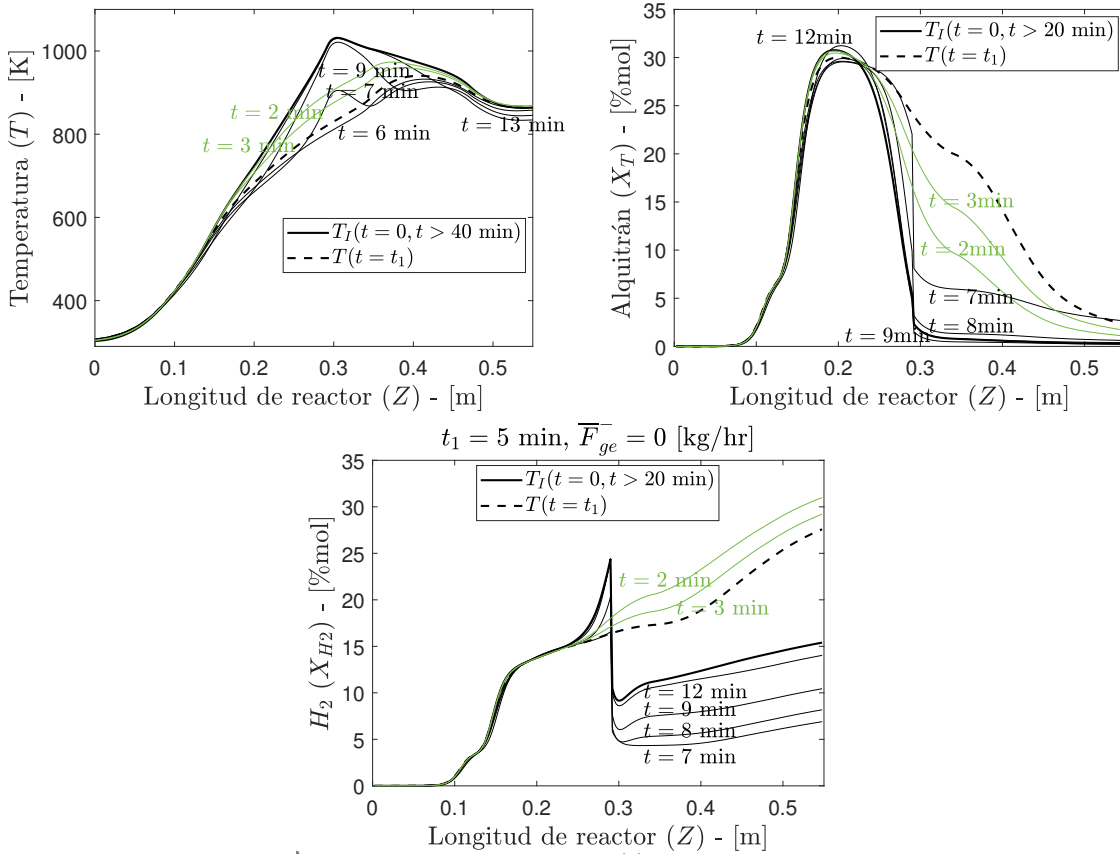


Figura 6.3: Trayectoria $\mathbf{x}_1(t)$: inicia y finaliza en $\bar{\mathbf{x}}$

de temperatura decrece 160 K y se desplaza 0.13 m hacia el fondo del reactor cuando el pulso finaliza, posteriormente el perfil incrementa su temperatura de 0.4–0.55 m, mientras que decrece en las otras ubicaciones del reactor hasta alcanzar el EE de rejilla después de 115 min, y (II) los perfiles de concentración molar poseen un tiempo de asentamiento 10 min más rápido que el del perfil de temperatura, de igual forma se muestran cambios en cada uno de los perfiles hasta que se alcanza el EE de rejilla, disminuyendo en su totalidad el perfil de hidrógeno, mientras que para el de alquitrán el perfil incrementa de 0.3 – 0.55 m.

Considerando el modelo de orden N_t , para un pulso de duración $t_3 = 38 \text{ min} > t_2 > t_1$ se obtiene la trayectoria

$$\mathbf{x}_3(t) = \boldsymbol{\tau}_{\mathbf{x}}(t, \mathbf{x}_{10}, \mathbf{d}_3(t), \mathbf{p}_a, N_{pde}) \rightarrow \bar{\mathbf{x}}_E, \quad \mathbf{x}_{10} = \bar{\mathbf{x}}, \quad \mathbf{d}_3 = \left(F_{ge3}, \bar{\mathbf{d}}_C^T \right)^T \quad (6.3)$$

para la cual las trayectorias del sistema convergen al EE de extinción. En la Figura 6.5 se muestra la evolución de algunos perfiles, observando que: (I) el perfil de temperatura se reduce uniformemente, se tiene que al dejar de aplicar el pulso la temperatura del *hotspot* se reduce a 730 K y se desplaza 0.16 m hacia el fondo, para posteriormente continuar disminuyendo hasta alcanzar el EE de extinción, a pesar de haber restablecido el FAS nominal, y (II) para la fracción molar de los gases se observa que una vez que se restablece el FAS, las concentraciones de 0 – 0.3 m continúan decrementando, mientras las de 0.3 – 0.55 m ya no se incrementan y se mantienen cercanas a cero.

Las trayectorias anteriores se obtuvieron considerando las condiciones nominales de operación del gasificador (Tabla 3.1), así como el caso extremo en los pulsos de aire (au-

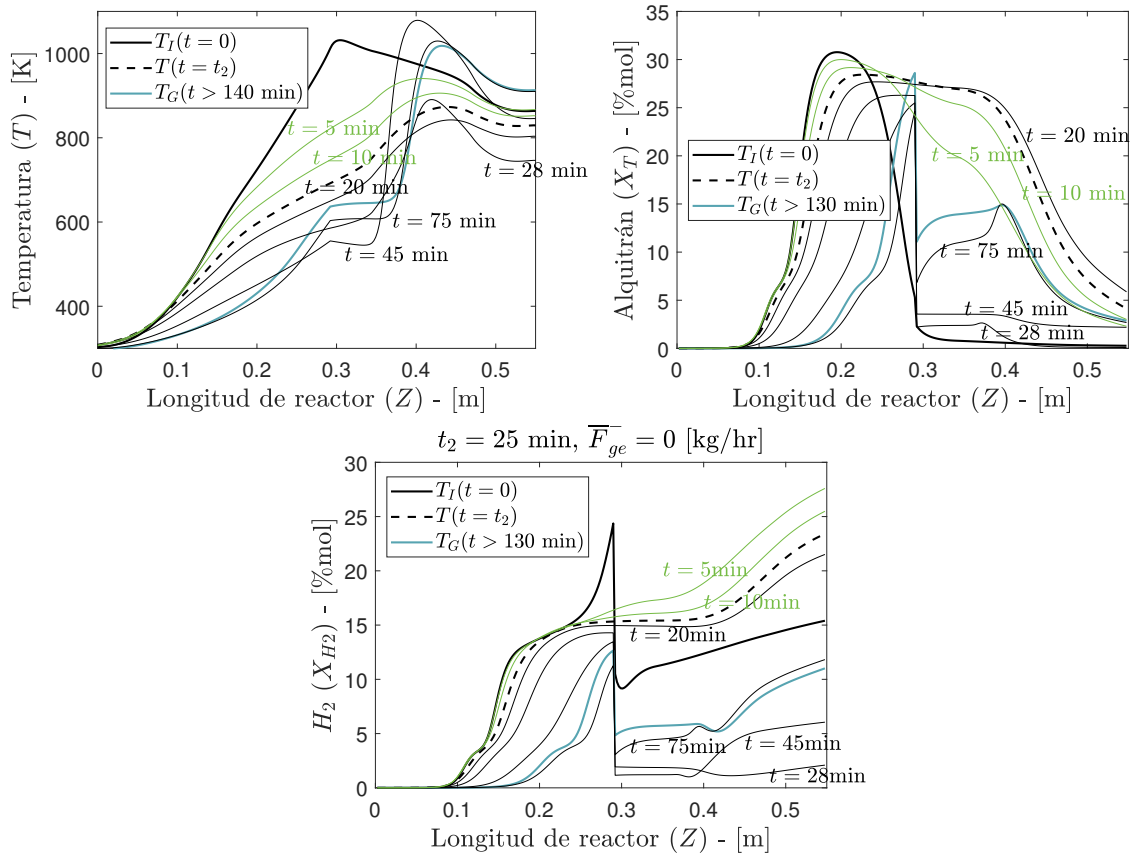


Figura 6.4: Trayectoria $\mathbf{x}_2(t)$: inicia en $\bar{\mathbf{x}}$ y finaliza en $\bar{\mathbf{x}}_G$

sencia total), con lo cual se observó que el EE nominal del gasificador es robusto ante esa clase perturbaciones y que el EE de rejilla ayuda a evitar extinción total del gasificador para una duración t_2 en ausencia total del FAS.

Comparación con distinto contenido de humedad en la biomasa

Tomando como punto de partida los resultados reportados en los diagramas de bifurcación de la Figura 5.3, se sabe que con decrementos en el FAS superiores al 78.8% (o 73%) respecto al valor nominal con bajo (o alto) contenido de humedad en la biomasa (CHB), mantenidos por un tiempo lo suficientemente prolongado, el EE en el cual operará el gasificador es el de extinción.

Teniendo en mente lo anterior y los resultados para las trayectorias $\mathbf{x}_1(t)$, $\mathbf{x}_2(t)$, $\mathbf{x}_3(t)$ con condiciones de operación nominales, se realizaron una serie de simulaciones para CHB de 2 y 15% considerando dos grados de libertad: la amplitud (magnitud) y duración de los pulsos en el FAS. Para el caso con bajo (2%) CHB se consideran amplitudes $F_{ge}^- \in [0, 0.912]$ [kg/h], mientras que con alto (15%) CHB $F_{ge}^- \in [0, 1.2312]$ [kg/h], en ambos casos las duraciones de los pulsos están dadas para $t \in [0, 300]$ min. Se deja evolucionar las trayectorias alrededor de unos 600 min (considerando la duración de los pulsos) y para cada simulación se registra el EE alcanzado después del transitorio. En la Figura 6.6 se muestran los resultados obtenidos en las simulaciones.

Para el caso con 2% en CHB (gráfica izquierdo) se encontró que existe una curva β_* de tipo-bifurcación que separa en dos regiones al plano que presenta los EEs alcanzados debido

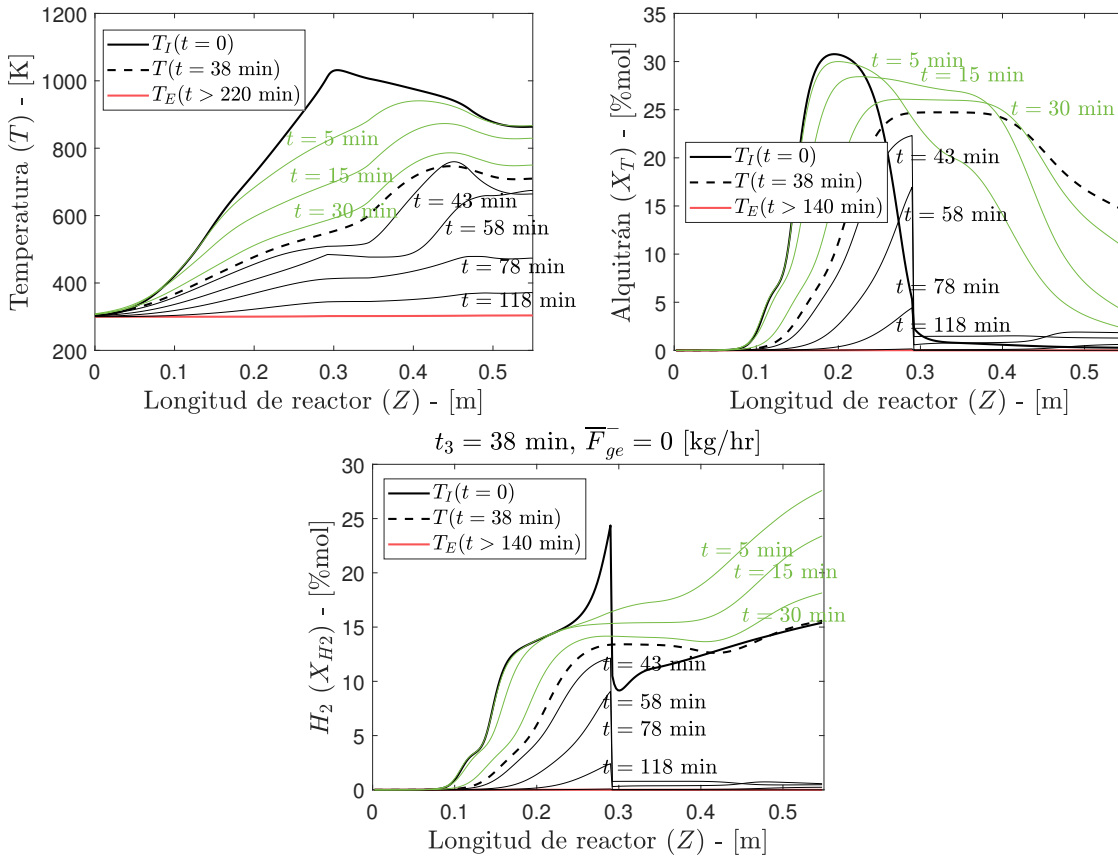


Figura 6.5: Trayectoria $\mathbf{x}_3(t)$: inicia en $\bar{\mathbf{x}}$ y finaliza en $\bar{\mathbf{x}}_E$

a las combinaciones de amplitud-duración del pulso en el FAS, siendo las únicas opciones el EE nominal (I) o el EE de extinción (E). De igual forma se aprecia una asíntota vertical β que coincide con el FAS de bifurcación $F_{HI_2\%}^*$ donde la duración de pulso tiende a infinito, lo cual significa que ya no existirá transición al EE de extinción y que las trayectorias permanecerán en la cuenca de atracción del EE nominal. Del análisis de bifurcación del Capítulo 5 se sabe que en condiciones nominales de FAS el reactor es biestable, por lo que los resultados obtenidos son congruentes con lo reportado previamente, ya que sólo se puede alcanzar alguno de estos EEs (nominal o extinción) cuando el FAS se restablece al valor nominal. Adicionalmente, se confirma que para pulsos con FAS superior al valor de bifurcación $F_{HI_2\%}^*$, las trayectorias siempre regresan al EE nominal, lo cual es una muestra de robustez de dicho EE.

Para el caso con 15% en CHB (gráfica derecha), se observan tres regiones en el plano, separadas por dos curvas de tipo-bifurcación: (I) θ_* que separa los casos que regresaron al EE nominal y los que llegaron al EE de rejilla (G), y (II) θ^* que separa los casos que llegaron al EE de rejilla de los que se fueron a extinción. De igual forma se tiene una asíntota vertical θ que coincide con el FAS de bifurcación $F_{HI_{15\%}}^*$, la cual indica que para pulsos con FAS superiores a dicho valor ya no será posible transitar a otro EE distinto al nominal, debido a que las trayectorias permanecerán en su cuenca de atracción. Los resultados obtenidos son consistentes con lo reportado en el Capítulo 5, con lo cual se valida la triestabilidad en la operación con FAS nominales para el caso con 15% de CHB.

Los resultados anteriores proporcionan una perspectiva más amplia a la mostrada para el caso de pulsos con ausencia total de FAS, ya que demuestran la existencia de

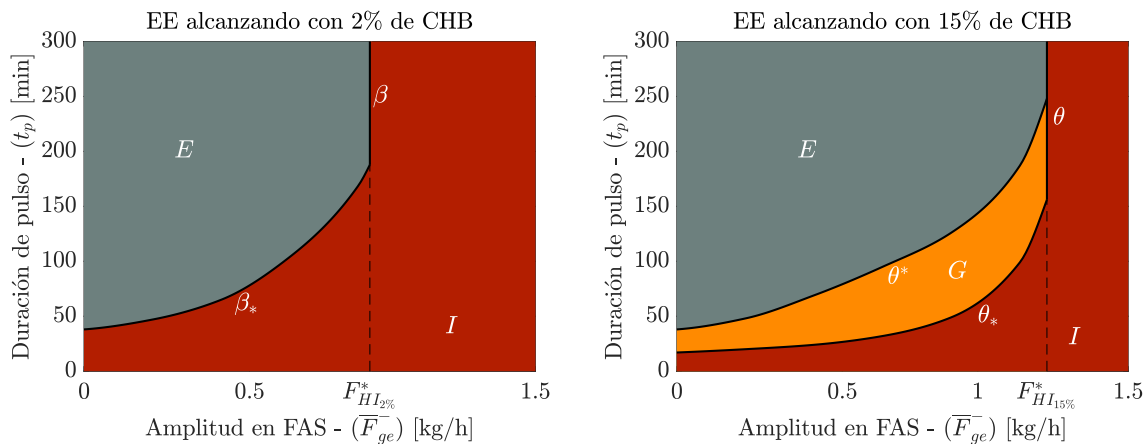


Figura 6.6: Respuesta a pulso con decremento en el FAS: plano amplitud-duración de pulso y el EE al que convergen las trayectorias, partiendo del EE nominal

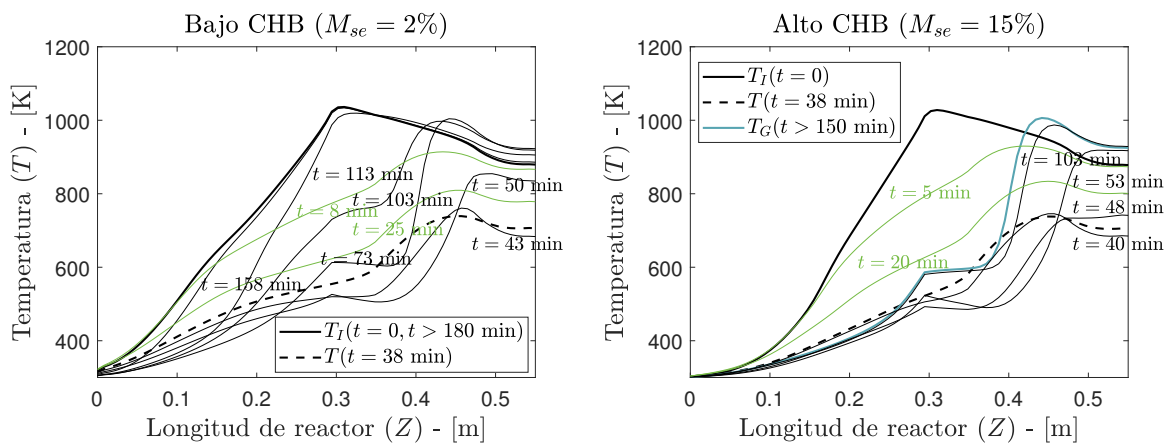


Figura 6.7: Respuesta a decremento en FAS a 0 kg/h por 30 min: Evolución del perfil de temperatura con 2 y 15% de CHB

combinaciones de amplitudes y duraciones de pulsos que pueden inducir comportamientos transitorios muy distintos entre sí. De igual forma se aprecia la repercusión del CHB en los EEs que es posible alcanzar debido a un mismo pulso, muestra de lo anterior se presenta en la Figura 6.7, donde se considera un pulso con total ausencia de FAS y una duración de 30 min. En la gráfica izquierda se muestra la respuesta para el caso con bajo CHB, es posible observar que a pesar de que el perfil de temperatura se decremента hasta que el *hotspot* alcanza una temperatura de 720 K y se desplaza unos 0.16 m hacia el fondo, las trayectorias regresan al EE nominal después de unos 142 min debido a la cuenca de atracción del EE nominal. Por otro lado, en la gráfica del lado derecho se muestra la respuesta al mismo pulso, pero considerando un alto CHB, es posible observar que una vez que el FAS se restablece a su valor nominal, las trayectorias del sistema caen dentro de la cuenca de atracción del EE de rejilla y que después de unos 112 min se alcanza dicho EE.

Vale la pena recordar que en la práctica es más probable que la biomasa posea un contenido de humedad superior al 2%, por lo que en todas esas operaciones siempre estará presente el EE de rejilla, el cual se ha mostrado que resulta adecuado para operar. Esta manera de alcanzar el EE de rejilla, a partir del EE nominal, puede resultar conveniente para un análisis experimental posterior, enfocado en verificar la existencia de dicho EE.

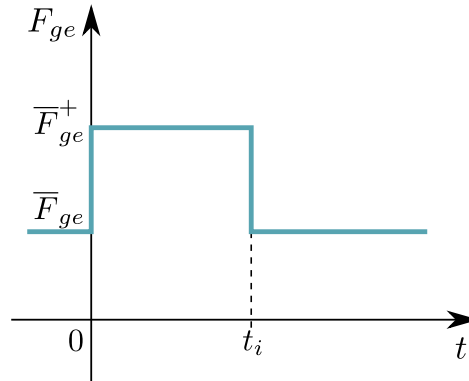


Figura 6.8: Perturbación tipo pulso en el FAS (incremento)

6.2.2. Pulsos de aire aplicados en EE de rejilla

Cuando se está en el EE de rejilla, pero se pretende o desea operar en el EE nominal, del diagrama de bifurcación con condiciones nominales de alimentación y CHB mostrado en la Figura 5.2, se sabe que si el FAS se incrementa por arriba del punto de bifurcación F_{HG}^* las trayectorias del sistema deberían converger hacia el EE nominal. De manera similar a las trayectorias estudiadas previamente, se plantea una trayectoria generada por un pulso de aire, ahora, incremental (con respecto del valor nominal) como el mostrado en la Figura 6.8, aplicado al EE de rejilla que converja al EE nominal, de la forma

$$\mathbf{x}_4(t) = \tau_{\mathbf{x}}(t, \mathbf{x}_{40}, \mathbf{d}_1(t), \mathbf{p}_a, N_{pde}) \rightarrow \bar{\mathbf{x}}, \quad \mathbf{x}_{40} = \bar{\mathbf{x}}_G, \quad \mathbf{d}_4 = (F_{ge4}, \bar{\mathbf{d}}_C^T)^T \quad (6.4a)$$

$$F_{ge4} = \begin{cases} \bar{F}_{ge}^+ & \text{si } t \in [0, t_4) \\ \bar{F}_{ge} & \text{si } t \geq t_4 \end{cases} \quad (6.4b)$$

$$(\bar{F}_{ge}^+, \bar{F}_{ge}) = (5.93, 4.56) \text{ [kg/h]}, \quad t_4 = 75 \text{ min}$$

En la Figura 6.9 se presenta la evolución de algunos perfiles de la trayectoria (6.4), es posible observar que: (I) una vez que el pulso se retira, el *hotspot* del perfil de temperatura eleva su valor hasta unos 1050 K y se desplaza unos 0.03 m hacia la cima, con lo cual las trayectorias caen dentro de la cuenca de atracción del EE nominal, alcanzándolo después de unos 120 min, y (II) para el caso de la fracción molar del CO , se observa un comportamiento congruente con la evolución del perfil de temperatura, ya que comienza a incrementarse gradualmente hasta que alcanza el valor del EE nominal en un tiempo similar.

De manera complementaria, se presenta la Figura 6.10 donde se muestra la evolución del poder calórico inferior del gas de síntesis y la eficiencia de gas frío, con la finalidad de tener una perspectiva global de la evolución de los estados. Se observa que cuando se aplica el pulso (incremento en el FAS) la respuesta es rápida y la tendencia de ambas variables es de incrementar su valor, una vez que el FAS regresa al valor nominal, se presenta una respuesta donde las variables decrecen considerablemente debido al cambio súbito en el FAS, además pareciera que las trayectorias intentar regresar al valor correspondiente en el EE de rejilla, sin embargo la cuenca de atracción del EE nominal gana y se da un crecimiento súbito en ambas variables, para después converger de manera exponencial hacia el valor correspondiente en el EE nominal en aproximadamente 205 min.

Los resultados presentados previamente son una muestra más de la multiplicidad de EEs presente en el gasificador, ya que en función del tipo de multiplicidad que se posea,

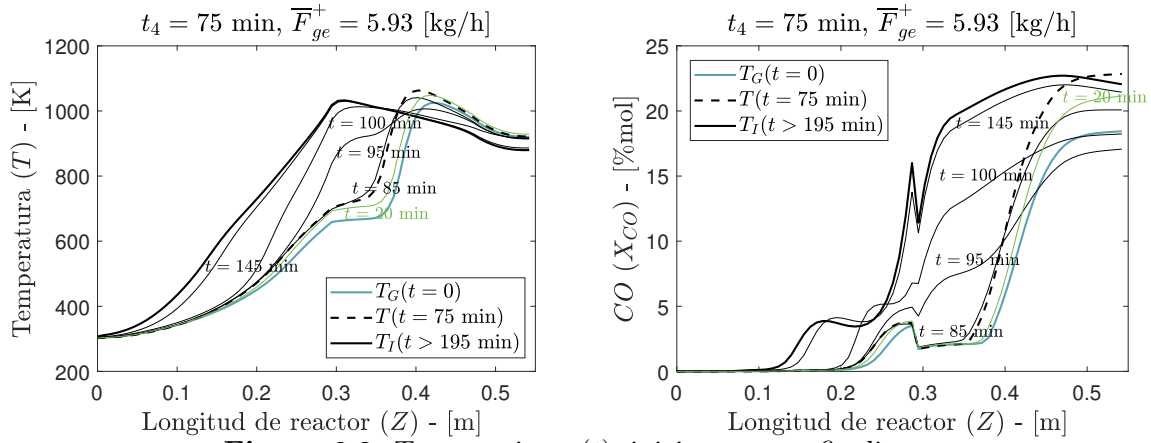


Figura 6.9: Trayectoria $x_4(t)$: inicia en \bar{x}_G y finaliza en \bar{x}

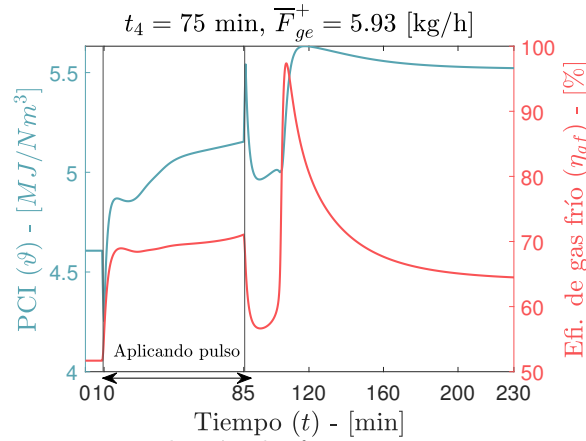


Figura 6.10: Evolución de ϑ y η_{gf} , para trayectoria $x_4(t)$

existen distintos comportamientos transitorios, mientras que el diseño de las trayectorias (6.1), (6.3) y (6.4) fue posible gracias a la información proporcionada por los diagramas de bifurcación.

6.3. Arranque

Para finalizar el Capítulo de análisis del régimen transitorio, se presenta el arranque del gasificador considerando las condiciones descritas por Yucel y Hastaoglu (2016), que van acorde con lo que recomienda el fabricante (AllPowerLabs, 2021). La rutina de arranque se da siguiendo los siguientes pasos:

- Se llena el reactor con carbón desde la rejilla hasta la zona donde se encuentran las boquillas que inyectan el aire (0.30 – 0.55 m), mientras que el resto se llena con biomasa (0 – 0.3 m).
- Para iniciar la combustión, se suministra energía con una antorcha a través de un puerto de ignición por un máximo de 5 minutos, con lo cual se eleva la temperatura en una sección en el interior del reactor (0.3 – 0.45 m).
- Posteriormente, se retira la antorcha y el flujo de aire suministrado se lleva a su valor máximo y se mantiene hasta que el gasificador alcanza el EE nominal de ignición.

Para el estudio de arranque del gasificador, no se cuenta con datos experimentales de la

evolución temporal de temperatura en los termopares instalados, por lo cual los resultados obtenidos con simulaciones estarán enfocados a una descripción cualitativa de la trayectoria de arranque.

Para las simulaciones, se considera que la operación inicia justo en el instante en que la antorcha se retira y que el flujo de aire suministrado es cambiado a su valor máximo. Lo anterior implica que se tendrá un perfil de temperatura inicial que se toma como grado de libertad, debido a que dependiendo del tiempo que se mantenga la antorcha el perfil de temperatura inicial puede cambiar su amplitud. El perfil de condición inicial de los sólidos dentro del reactor se considera con biomasa de $0 - 0.28$ m y carbonizado de $0.28 - 0.55$ m (Yucel y Hastaoglu, 2016), mientras que el contenido de humedad en la biomasa y el flujo de aire máximo son considerados con los valores que se han tomado como nominales en este estudio (Tabla 3.1).

Como se ha mostrado previamente, con condiciones nominales de operación el gasificador es triestable y dado que se considera como grado de libertad el perfil de temperatura inicial para el arranque del reactor, es posible que dependiendo de la magnitud de éste se tenga un arranque exitoso, que no encienda o que se alcance el EE de rejilla. Los dos primeros casos son los conocidos en la práctica, mientras que el caso en donde se alcanza el EE de rejilla no ha sido reportado en la literatura, sin embargo, es posible que se dé debido a la multiplicidad de EEs que posee el reactor. Con lo anterior presente se puede definir un conjunto de trayectorias de arranque como

$$\Xi_s(\mathbf{p}_a, N_t, t) = \{\mathbf{x}_I(t), \mathbf{x}_G(t), \mathbf{x}_E(t)\} \quad (6.5a)$$

donde

$$\mathbf{x}_I(t) = \tau_s(t, \mathbf{x}_{I0}, \bar{\mathbf{d}}, \mathbf{p}_a, N_t) \rightarrow \bar{\mathbf{x}} \quad (6.5b)$$

$$\mathbf{x}_G(t) = \tau_s(t, \mathbf{x}_{G0}, \bar{\mathbf{d}}, \mathbf{p}_a, N_t) \rightarrow \bar{\mathbf{x}}_G \quad (6.5c)$$

$$\mathbf{x}_E(t) = \tau_s(t, \mathbf{x}_{E0}, \bar{\mathbf{d}}, \mathbf{p}_a, N_t) \rightarrow \bar{\mathbf{x}}_E \quad (6.5d)$$

son las trayectorias que llegan a los EEs nominal $\bar{\mathbf{x}}$, de rejilla $\bar{\mathbf{x}}_G$ y de extinción $\bar{\mathbf{x}}_E$, respectivamente, considerando entradas exógenas nominales $\bar{\mathbf{d}}$, los parámetros calibrados \mathbf{p}_a , el orden eficiente $N_t = 70$ y las condiciones iniciales $\mathbf{x}_{I0}, \mathbf{x}_{G0}, \mathbf{x}_{E0}$ correspondientes para cada trayectoria.

El perfil de sólidos es el mismo para las tres condiciones iniciales: biomasa con contenido de humedad de 7.28% de $0 - 0.28$ m y carbonizado de $0.28 - 0.55$ m. Para el perfil de temperatura dentro del gasificador, se considera que de $0.31 - 0.43$ m se tendrá un valor constante (consecuencia de haber colocado la antorcha en el puerto de ignición durante distintos periodos de tiempo), mientras que la temperatura en las demás zonas es de 300 K. Se realizó una exploración con distintos valores del perfil de temperatura inicial, encontrando que: (I) con 873 K se alcanza el EE nominal, (II) con 773 K se llega al EE de rejilla, y (III) con 673 K el reactor no se enciende y regresa al EE de extinción.

En la Figura 6.11 se presenta la evolución temporal de los perfiles de temperatura debidos a cada condición inicial. Es posible observar que en función de las condiciones iniciales se poseen rutinas de arranque exitosas (las que llevan al EE nominal o al de rejilla) y una no deseada donde el reactor no enciende. Cabe señalar que los perfiles de temperatura a los 5 min poseen diferencias significativas, las cuales hacen que las trayectorias se dirijan hacia alguna de las cuencas de atracción de los EEs estables, lo cual se observa para el tiempo de 100 min donde han convergido al EE correspondiente. Debido a que no se poseen datos experimentales con los cuales comparar, no se realizará

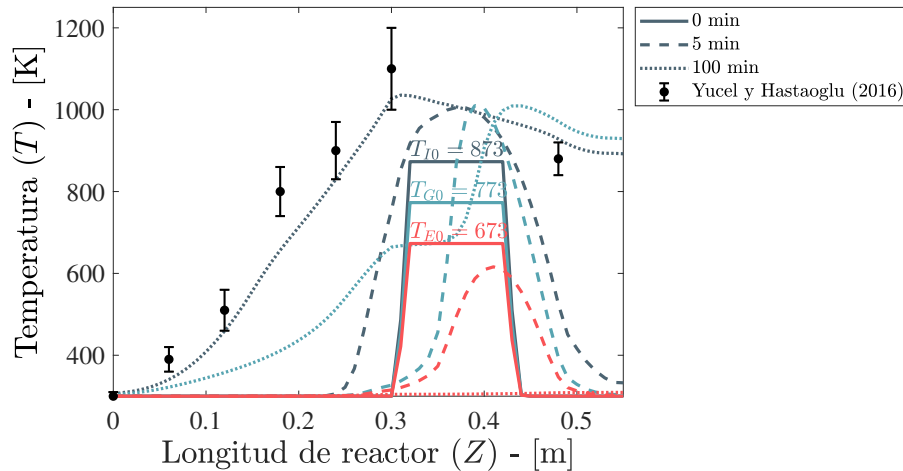


Figura 6.11: Trayectorias de arranque $x_I(t)$, $x_G(t)$ y $x_E(t)$: evolución de perfil de temperatura

un análisis más exhaustivo, quedando pendiente para una exploración posterior con datos experimentales (de la literatura o propios), para discutir sobre la respuesta transitoria y reflexionar sobre la rutina de arranque que el fabricante recomienda.

Los resultados obtenidos en este Capítulo permiten estudiar la robustez ante perturbaciones en el FAS del EE nominal, así como describir cualitativamente la rutina de arranque del gasificador bajo distintas condiciones iniciales. En ambos casos se demuestra la influencia de la multiplicidad de EEs en la operación del gasificador, lo cual resulta de gran utilidad para predecir el comportamiento del sistema ante situaciones como las aquí presentadas.

6.4. Contribuciones del Capítulo

1. Un modelo de orden eficiente $N_t = 70$ describe los conjuntos límite del gasificador, así como el comportamiento transitorio de dos trayectorias debidas a perturbaciones tipo pulso decremental en el flujo de aire suministrado: (I) una que inicia en el EE nominal y que regresa a este, y (II) otra que inicia en el EE nominal y finaliza en el EE de rejilla.
 - Se verifica que las trayectorias de las componentes en fase gas (variables en estado cuasiestacionario) en general alcanzan el EE de 10 a 20 minutos antes que las de fase sólida y temperatura (variables dinámicas), como se muestra en las Figuras 6.3 y 6.4.
2. Para el caso en que se retira totalmente el flujo de aire suministrado, en función del tiempo en que se mantenga operando de esa forma las trayectorias que inician desde el EE nominal pueden: (I) regresar al EE nominal si la duración del pulso es menor a 17 minutos, (II) transitar al EE de rejilla si la duración del pulso es de 17 a 38 minutos, y (III) finalizar en el EE de extinción si la duración del pulso es mayor a 38 minutos.
3. Existe una amplia combinación de valores del flujo de aire suministrado y de duración en que se mantiene el pulso para poder generar una transición desde el EE nominal a alguno otro. Para los casos con bajo y alto contenido de humedad estudiados en

el Capítulo 5:

- Se confirmó la naturaleza biestable del caso con bajo contenido de humedad y triestable con alto contenido de humedad en la biomasa (Figura 6.6).
 - Los valores de flujo que pueden causar una transición a otro EE son menores a los valores de bifurcación F_{HI}^* de la Figura 5.3, mientras que para valores mayores nunca se produce un cambio de EE a pesar de que la duración del pulso se incrementa.
4. Cuando el gasificador opera en el EE de rejilla (bajo condiciones nominales), es posible llevar su operación al EE nominal con un pulso de aire con amplitud por arriba del valor del punto de bifurcación F_{HG}^* reportado en la Figura 5.2.
 5. En el arranque del gasificador, considerando las recomendaciones dadas por el fabricante para la distribución del carbonizado y la biomasa, se encontró que para distintos perfiles de temperatura inicial se pueden tener los siguientes casos (Figura 6.11):
 - El reactor no enciende (las trayectorias convergen al EE de extinción).
 - Las trayectorias alcanzan al EE de rejilla.
 - El gasificador alcanza el EE nominal.

En esta tesis se estudió a gasificadores en configuración Imbert con precalentamiento de aire, encontrando que el gasificador posee distintos tipos de multiplicidad de EEs dependiendo del contenido de humedad en la biomasa y el flujo de aire suministrado, siendo triestable para condiciones nominales de operación. El estudio de la dinámica no lineal se realizó utilizando el modelo en EDP del reactor con precalentamiento de aire, al cual se le aplicó la metodología de modelado eficiente propuesta por Badillo-Hernandez et al. (2019), lo que permitió realizar el análisis en régimen estacionario y transitorio. El sistema bajo estudio forma parte sistemas de gasificación comerciales de escala piloto, por lo que los resultados obtenidos son de utilidad para un amplio público.

En particular se encontró que:

1. Es posible reproducir los datos experimentales del EE nominal, con un modelo de orden $N_{exp} = 21$ (105 EDOs, 210 EAs) y tener una representación equivalente a la reportada en la literatura con modelos que resuelven 3,120 EDOs.
2. Para condiciones nominales de operación, el EE nominal está acompañado de un EE estable de rejilla, uno estable de extinción y dos inestables de alta y baja conversión, los cuales son descritos eficientemente con un modelo de orden $N_S = 61$.
3. Dependiendo del contenido de humedad en la biomasa en conjunción con el flujo de aire suministrado, el tipo de multiplicidad que puede poseer el gasificador va desde mono, bi o triestabilidad, siendo el caso triestable el más común ya que se presenta para casos con contenido de humedad superiores a 4.6 %.
4. Estando en el EE nominal, dependiendo del par amplitud-duración de pulso decreciente en el flujo de aire, se mostró que las trayectorias pueden regresar al EE nominal, viajar al EE de rejilla o llegar al EE de extinción.
5. Cuando opera en el EE de rejilla, mediante un pulso incremental en el flujo de aire es posible alcanzar el EE nominal.
6. En el arranque del gasificador las características de las condiciones iniciales determinan si se alcanza el EE nominal, el EE de rejilla o el EE de extinción.
7. El análisis del comportamiento transitorio (respuesta a pulsos y arranque) se realizó con un modelo de orden eficiente $N_t = 70$.

Los resultados obtenidos para el gasificador Imbert con 0% en contenido de humedad, son consistentes con lo reportado para un reactor estratificado (Badillo-Hernandez et al.,

2019) que trabaja con cascara de arroz con 0% de humedad, ya que ambos casos exhiben biestabilidad. El EE de rejilla encontrado en este trabajo, explica los comportamientos anormales reportados para gasificadores estratificados (Di Blasi, 2000) e Imbert (Simone et al., 2013), donde bajo condiciones extremas de operación (alto contenido de humedad y altos flujos de entrada) reportan un EE de baja producción, en este trabajo se demuestra que si el EE que reportan se lleva a las condiciones nominales de operación, poseerá características similares al EE nominal, lo cual lo hace adecuado para operar.

El entendimiento de la dinámica no lineal presente en el gasificador Imbert con precalentamiento de aire, permite tener consciencia de los comportamientos que el sistema puede exhibir bajo condiciones específicas, lo cual proporciona elementos para tomar decisiones sobre su operación y mantenerla dentro de márgenes deseados. De igual forma, permite distinguir las rutinas en las cuales el uso de estrategias de control y estimación pueden ser de gran apoyo para garantizar una operación segura y confiable del gasificador, así como identificar los comportamientos que se deben considerar para que el diseño de dichas estrategias sea efectivo.

7.1. Trabajo futuro

Los resultados obtenidos proporcionan una descripción global del gasificador Imbert, brindando un entendimiento del sistema con consciencia de la dinámica no lineal del proceso y sus implicaciones en este. Por lo anterior, representa un sólido punto de partida para realizar trabajo:

- Experimental
 - Encontrar el EE de rejilla mediante pulsos decrementales de aire desde el EE nominal, o en arranque desde el EE de extinción.
 - Validar los diagramas de bifurcación, al disminuir el flujo de aire desde EEs nominal y de rejilla.
- Teórico
 - Efecto en la multiplicidad de contar con el precalentador de aire.
 - Extensión de entendimiento de la dinámica no lineal a sistemas con más unidades de integración de energía en el proceso (secador y pireactor).
 - Optimización de cantidad y ubicación de unidades de integración de energía, para maximizar el aprovechamiento de la energía del proceso.
 - Diseño de estrategias de identificación de parámetros como la dispersión térmica, contenido de humedad, etc.
 - Reproducir rutinas de encendido con el modelo.
 - Diseño de estrategias de estimación de estados y de control basadas en modelo que permitan: arrancar de manera rápida y segura al reactor, mantener la operación del sistema dentro de rangos convenientes o seguimiento de trayectorias que representen escenarios cambiantes en la demanda del gas de síntesis
 - Análisis de apagado del gasificador, comparando contra datos experimentales.

APÉNDICE A

MODELADO DE GASIFICADOR CON INTEGRACIÓN DE CALOR

En este Apéndice se presentan las funciones que se utilizan en el Capítulo 3 para definir el modelo del gasificador Imbert con precalentamiento de aire, tanto para el interior del reactor como para el precalentador de aire. De igual manera se proporcionan los valores de los parámetros de la cinética química considerada, así como los relacionados con las dimensiones y materiales del precalentador de aire. Finalmente, se presentan las definiciones del poder calórico inferior y de la eficiencia de gas frío, que son empleados como indicadores del desempeño del gasificador.

A.1. Velocidades de reacción y conductividad térmica

Los términos relacionados con las velocidades de reacción están dados por

$$k_j(T) = A_j \exp\left(-\frac{E_j}{R_g T}\right), \quad j = 0, \dots, 11 \quad (\text{A.1a})$$

$$k_i^e(T, u_g, u_s) = \frac{\eta_p}{k_i^{-1}(T) + k_m^{-1}(T, u_g, u_s)}, \quad i = 8, 9, 10, 11 \quad (\text{A.1b})$$

$$k_m = 2.06 \left(\frac{u_g}{\varepsilon}\right) \text{Re}^{-0.575} \text{Sc}^{9-2/3} \quad (\text{A.1c})$$

$$\text{Re}(T, u_g, u_s) = \frac{d_p(u_s) \rho_g(T) u_g}{\mu_g(T)} \quad (\text{A.1d})$$

$$\text{Sc} = \frac{\mu_g(T)}{\rho_g(T) D_m} \quad (\text{A.1e})$$

$$d_p(u_s) = d_{p0} \left[(1 - \chi_A) \left(\frac{u_s}{u_{s0}}\right) + \chi_A \right]^{1/3} \quad (\text{A.1f})$$

$$\eta_p(u_s) = \frac{6(1 - \varepsilon)}{d_p(u_s)} \quad (\text{A.1g})$$

$$\mu_g(T) = 1.98 \times 10^{-5} \left(\frac{T}{300} \right) \quad (\text{A.1h})$$

$$D_m = 0.2 \times 10^{-4} \left[\frac{\text{m}^2}{\text{s}} \right] \quad (\text{A.1i})$$

$$\chi_A = 0.39 \quad (\text{A.1j})$$

mientras que los relacionados con la conductividad térmica (Goldman, Xieu, Oko, Milne, y Essenhigh, 1985; Gamson, 1951) se definen como

$$K(T) = (1 - \varepsilon)K_s^e(T) + \varepsilon K_g(T) \quad (\text{A.2a})$$

$$K_g(T) = 4.8 \times 10^{-4} T^{0.717} \quad (\text{A.2b})$$

$$K_s^e = h_{rg}(T)d_p(u_s) + k_r(T, u_s) \quad (\text{A.2c})$$

$$k_r(T, u_s) = \left[\frac{K_s(T)}{d_p(u_s)h_{rs}(T)} + 1.43(1 - 1.2\varepsilon) \right]^{-1} \quad (\text{A.2d})$$

$$K_s(T) = 0.0013 + 0.05 \left(\frac{T}{10^3} \right) + 0.63 \left(\frac{T}{10^3} \right)^2 \quad (\text{A.2e})$$

$$h_{rg}(T) = 4\sigma\epsilon_g T^3 \quad (\text{A.2f})$$

$$h_{rs}(T) = 4\sigma\epsilon_s T^3 \quad (\text{A.2g})$$

$$(\epsilon_s, \epsilon_g) = (0.85, 0.05) \quad (\text{A.2h})$$

$$\sigma = 5.67 \times 10^{-8} \left[\frac{\text{W}}{\text{m}^2\text{K}^4} \right] \quad (\text{A.2i})$$

donde E_j (o A_j) es la energía de activación (o factor pre exponencial) de la j -ésima reacción, R_g es la constante del gas ideal, Re (o Sc) es el número de Reynolds (o Schmidt) del gas dentro del reactor, μ_g (o D_m) es la viscosidad dinámica (o difusividad másica) del gas dentro del reactor, χ_A es la fracción de cenizas en el carbonizado, K es la conductividad térmica efectiva del lecho, ϵ_s (o ϵ_g) es la emisividad térmica del sólido (o gas), σ es la constante de Stefan-Boltzmann. Los valores de los parámetros de cinética-transporte químico están dados en la Tabla A.1.

A.2. Coeficientes de transferencia de energía en precalentador de aire

Los productos de los coeficientes de transferencia de energía por área se calculan siguiendo las fórmulas reportadas en Bergman et al. (2011) y resultan en:

- Del lecho al gas de síntesis en sección anular

$$h_{bg}(T_h, F_{he}) = U_g^1(A_r^1) = \frac{1}{\frac{d_I^i/2}{K_I^i A_{oI}^i} + \frac{d_o^i}{K_o^i A_{oI}^i} + \frac{1}{h_g^i A_i^i}} \quad (\text{A.3a})$$

- De pared externa a los alrededores

$$h_{wa}(T_h, F_{he}) = U_s^2(A_r^2) = \frac{1}{\frac{d_I^e/2}{K_I^e A_{oI}^e} + \frac{d_o^e}{K_o^e A_{oI}^e} + \frac{1}{h_{sr}^e A_o^e}} \quad (\text{A.3b})$$

Tabla A.1: Velocidades de reacción y parámetros.

R_j	A_j	E_j [kJ/mol]	ΔH_j
$R_1 = k_1(T)C_M^s$	$5.13 \times 10^6 [\text{s}^{-1}]^a$	87.9^a	$419[\text{kJ/kg}]^b$
$R_2 = k_2(T)C_B^s$	$1.516 \times 10^3 [\text{s}^{-1}]^c$	62.8^c	$-420[\text{kJ/kg}]^d$
$R_3 = k_3(T)C_T^g$	$4.28 \times 10^{-6} [\text{s}^{-1}]^e$	107^e	$42[\text{kJ/kg}]^d$
$R_4 = k_4(T)C_1^g C_7^g T$	$9.2 \times 10^4 [\text{m}^3(\text{kmol K s})^{-1}]^f$	80.5^f	$-17, 473[\text{kJ/kg}]^f$
$R_5 = k_5(T)C_1^g C_6^g T$	$9.2 \times 10^4 [\text{m}^3(\text{kmol K s})^{-1}]^f$	80.5^f	$-50, 190[\text{kJ/kg}]^f$
$R_6 = k_6(T)C_1^g$	$1.3 \times 10^{11} [(\text{m}^3(\text{kmol K})^{-1})^{1.5} \text{s}^{-1}]^g$	125.58^g	$-10, 107[\text{kJ/kg}]^f$
$R_7 = k_7(T)C_1^g C_2^g$	$1 \times 10^8 [\text{m}^3(\text{kmol s})^{-1}]^h$	84^h	$142, 919[\text{kJ/kg}]^f$
$R_8 = k_8^f(T)C_3^g C_5^g$ $-k_8^f(T)C_2^g C_4^g$	$A_{8f} = 2.78 \times 10^3 [\text{m}^3(\text{kmol s})^{-1}]^i$ $A_{8b} = 1.05 \times 10^5 [\text{m}^3(\text{kmol s})^{-1}]^i$	$E_{8f} = 12.6^i$ $E_{8b} = 20.3^i$	$-41, 200[\text{kJ/kmol}]^k$
$R_9 = k_9^e(T, v_g, v_s)C_1^g$	$5.67 \times 10^9 [\text{m/s}]^l$	160^l	$-2.5 \times 10^4 [\text{kJ/kg}]^k$
$R_{10} = k_{10}^e(T, v_g, v_s)C_4^g$	$7.92 \times 10^8 [\text{m/s}]^m$	218^m	$172, 600[\text{kJ/kmol}]^f$
$R_{11} = k_{11}^e(T, v_g, v_s)C_2^g$	$7.92 \times 10^5 [\text{m/s}]^m$	218^m	$-74, 930[\text{kJ/kmol}]^f$
$R_{12} = k_{12}^e(T, v_g, v_s)C_5^g$	$7.92 \times 10^8 [\text{m/s}]^m$	218^m	$131, 400[\text{kJ/kmol}]^f$

a- Chan, Kelbon, y Krieger (1985), b- Ge y Wang (2009), c- Roberts (1970), d- Di Blasi (1996), e- Liden, Berruti, y Scott (1988), f- Bryden y Ragland (1996), g- Cooper y Hallett (2000), h- Di Blasi (2000) i- de Souza-Santos (2010), j- Macak y Malecha (1978), k- Kashiwagi y Nambu (1992), l- Groeneveld y Van Swaaij (1980)

- Del gas de síntesis al aire en las tuberías

$$h_{cg}(Q_{ge}, F_{he}) = U_a^g(A_a^g) = \frac{1}{\frac{1}{h_t^g A_o^t} + \frac{(D_o^t - D_i^t)/2}{K_t A_o^t} + \frac{1}{h_t^g A_i^t}} \quad (\text{A.3c})$$

- Del lecho al aire en las tuberías

$$h_{bc}(F_{ge}) = U_a^1(A_a^1) = \frac{1}{\frac{d_i^1/2}{K_i^1 A_{oi}^1} + \frac{d_o^1}{K_o^1 A_{oi}^1} + \frac{(D_o^t - D_i^t)/2}{K_t A_o^t} + \frac{1}{h_t^g A_i^t}} \quad (\text{A.3d})$$

donde los coeficientes convectivos están dados por las siguientes expresiones:

- Para h_g^i , h_g^e

$$h_g^i = \frac{\text{Nu}_i K_o^i}{D_h} \quad (\text{A.4a})$$

$$h_g^e = \frac{\text{Nu}_o K_i^e}{D_h} \quad (\text{A.4b})$$

donde

$$\text{Nu}_{i,o} = 0.023 \text{Re}_D^g{}^{4/5} \text{Pr}_g^n \quad (\text{A.4c})$$

$$\text{Re}_D^g = \frac{\rho_g v_g D_h}{\mu_g} \quad (\text{A.4d})$$

$$\text{Pr}_g = \frac{\mu_g C_p^g}{K_g} \quad (\text{A.4e})$$

$$D_h = 2r_o^i - 2r_i^e \quad (\text{A.4f})$$

Tabla A.2: Propiedades de materiales del intercambiador de calor

Densidad	$[\rho_{ss}, \rho_{pr}, \rho_{gfb}] = [8055, 150, 28] \text{ kg/m}^3$
Calor específico	$[c_{pss}, c_{ppr}, c_{pgfb}] = [480, 837, 835] \text{ J/(kgK)}$
Conductividad térmica	$[K_{ss}, K_{pr}, K_{gfb}] = [15, 0.15, 0.075] \text{ W/(mK)}$

$$n = \begin{cases} 0.4 & \text{if } T_{w12} > T_g \text{ [Calentamiento]} \\ 0.3 & \text{if } T_{w12} < T_g \text{ [Enfriamiento]} \end{cases} \quad (\text{A.4g})$$

- Para h_t^g

$$h_t^g = \frac{\text{Nu}_x K_g}{L_p} \quad (\text{A.5a})$$

donde

$$\text{Nu}_x = 0.0308 \text{Re}_D^{4/5} \text{Pr}_g^{1/3} \quad (\text{A.5b})$$

- Para h_t^a

$$h_t^a = \frac{\text{Nu}_D K_a}{D_i^t} \quad (\text{A.6a})$$

donde

$$\text{Nu}_D = 0.023 \text{Re}_D^a{}^{4/5} \text{Pr}_a^{0.4} \quad (\text{A.6b})$$

$$\text{Re}_D^a = \frac{\rho_a v_a D_i^t}{\mu_a} \quad (\text{A.6c})$$

$$\text{Pr}_a = \frac{\mu_a c_p^a}{K_a} \quad (\text{A.6d})$$

- Para h_{sr}^e

$$h_{sr}^e = \frac{\overline{\text{Nu}}_L K_a}{L_s} \quad (\text{A.7a})$$

donde

$$\overline{\text{Nu}}_L = \left\{ 0.825 + \frac{0.387 \text{Ra}_L^{1/6}}{\left[1 + (0.492/\text{Pr}_a)^{9/16} \right]^{8/27}} \right\}^2 \quad (\text{A.7b})$$

$$\text{Ra}_L = \frac{g\beta(T_h - T_a)L^3}{\nu_s \alpha_s} \quad (\text{A.7c})$$

$$\beta = \frac{1}{T_f} \quad (\text{A.7d})$$

$$T_f = \frac{T_h + T_a}{2} \quad (\text{A.7e})$$

Para el caso de los coeficientes de conductividad térmica, estos están relacionados con los materiales por cuales están compuestas las paredes del gasificador. Para el sistema bajo estudio se tiene que el aislante en la pared interna es perlita, mientras que el de la externa es fibra de vidrio, los cuales están contenidos por dos placas de acero inoxidable. Las propiedades de densidad, calor específico y conductividad térmica para estos materiales están reportados en la Tabla A.2. Finalmente, las dimensiones del intercambiador de calor del sistema bajo estudio están dadas en la Tabla A.3.

Tabla A.3: Dimensiones de precalentador de aire

Dimensiones de precalentador (m)	
Grosor de material	$[d_{ss}, d_{gfb}] = [1.6, 3.2] \times 10^{-3}$
Diámetro de tubería	$[D_o^t, D_i^t] = [0.042, 0.038]$
Longitud de tubería	$L_t = 1.8288$
Radios de precalentador	$[r_o^i, r_i^e, r_o^e] = [0.1540, 0.1873, 0.1937]$

A.3. Indicadores de desempeño de operación del gasificador

• El poder calórico inferior (LHV, por sus siglas en inglés) de una sustancia, también llamado poder calórico neto, se define como la cantidad de calor que se libera al quemar completamente dicha sustancia. Para calcular el LHV del gas de síntesis (ϑ), que se puede ver como una medida de la calidad de su composición, se consideran las componentes que pueden ser quemadas, por lo cual queda definido como (Basu, 2010)

$$\vartheta = C_{H_2}^{gf} LHV_{H_2} + C_{CO}^{gf} LHV_{CO} + C_{CH_4}^{gf} LHV_{CH_4} \quad (A.8)$$

$$C_{H_2}^{gf} = C_{H_2}^g(L, t), \quad C_{CO}^{gf} = C_{CO}^g(L, t), \quad C_{CH_4}^{gf} = C_{CH_4}^g(L, t)$$

• La eficiencia de gas frío (CGE, por sus siglas en inglés) es una medida de la eficiencia del proceso de gasificación, está dada por la relación de la cantidad de energía en el gas de síntesis producido con la energía disponible en la biomasa (Basu, 2010):

$$\eta_{gf} = \frac{Q_{gf} \vartheta}{Q_{se} LHV_B} \times 100, \quad Q_{gf} = Q_g(Z, t), \quad Q_{se} : \text{ecuación (4.1b)} \quad (A.9)$$

Los valores LHV_i fueron tomados de Basu (2010) y son

$$(LHV_{H_2}, LHV_{CO}, LHV_{CH_4}, LHV_B) = (10.78, 12.63, 35.88, 18.6) \text{ [MJ/(Nm}^3\text{)]}$$

• La efectividad del intercambiador de calor (ε_{he}) es una medida para cuantificar que tanto se aprovecha el calor del gas de síntesis para precalentar el aire, esta dada por la relación que existe entre la transferencia real de calor con la transferencia máxima posible (Bergman et al., 2011):

$$\varepsilon_{he}(\boldsymbol{\psi}, \mathbf{d}) = \frac{T_{gI} - T_{ge}}{T_{gf} - T_{ge}} \quad (A.10)$$

$$T_{gI} = T_c(L, t), \quad T_{gf} = T(L, t)$$

APÉNDICE B

NORMAS DE ERRORES EXPERIMENTAL, PARAMÉTRICO Y DE DISCRETIZACIÓN

En este apéndice se presentan las definiciones de las métricas utilizadas en los capítulos 4 y 6 que permiten determinar los ordenes eficientes de modelo.

B.1. Para ajuste experimental

Cuando se dispone de datos experimentales, el error de ajuste debido a discretización (4.4) se calcula como

$$\varepsilon_d^{\bar{\mathbf{x}}ex}(\mathbf{p}, N) = \sum_{k=1}^{n_v} w_k \varepsilon_e^k, \quad \varepsilon_e^k := |\bar{\pi}_{k,e}(\mathbf{p}, Z_i) - E_x(\bar{\mathbf{x}})_k| \quad (\text{B.1})$$

donde ε_e^k es el error de ajuste de la k -ésima variable de estado en la que se tiene medición, w_k es un peso para la ponderación, n_v es el número de mediciones disponibles, $E_x(\bar{\mathbf{x}})_k$ es el k -ésimo elemento de un vector $\mathbf{E}_x(\bar{\mathbf{x}})$ que contiene los datos de las variables medidas, $\bar{\pi}_{k,e}$ es el k -ésimo elemento de un vector $\bar{\boldsymbol{\pi}}_e$ que contiene los valores calculados por el modelo de las variables medidas en las ubicaciones disponibles.

Para el análisis presentado en esta tesis se dispone de $n_v = 11$ mediciones (los valores están dados en la Tabla 3.3), el error asociado a cada una de estas se pondera con el mismo peso por lo cual $w_k = 1/11$, mientras que los vectores $\mathbf{E}_x(\bar{\mathbf{x}})$ y $\bar{\boldsymbol{\pi}}_e$ quedan definidos como

$$\mathbf{E}_x(\bar{\mathbf{x}}) = [T_{Z_1} \quad T_{Z_2} \quad T_{Z_3} \quad T_{Z_4} \quad T_{Z_5} \quad T_{Z_6} \quad T_{Z_7} \quad X_{H_2} \quad X_{CO} \quad X_{CO_2} \quad X_{CH_4}]^T \quad (\text{B.2})$$

$$\mathbf{E}_x(\bar{\mathbf{x}}) = [E_x(\bar{\mathbf{x}})_1 \quad \dots \quad E_x(\bar{\mathbf{x}})_{11}]^T$$

$$\boldsymbol{\pi}_e = \left[\begin{array}{cccccccc} T(N, Z_1) & T(N, Z_2) & T(N, Z_3) & T(N, Z_4) & T(N, Z_5) & T(N, Z_6) & T(N, Z_7) & \dots \\ C_{H_2}(N, L) & C_{CO}(N, L) & C_{CO_2}(N, L) & C_{CH_4}(N, L) & & & & \dots \end{array} \right]^T \quad (\text{B.3})$$

$$\boldsymbol{\pi}_e = [\bar{\pi}_{1,e} \quad \dots \quad \bar{\pi}_{11,e}]^T$$

donde T_k es la temperatura medida en la k -ésima ubicación y X_i es la fracción molar de la i -ésima componente gaseosa medida, cuyos valores se encuentran en la Tabla 3.3; $T(N, Z_k)$ es la temperatura en la k -ésima ubicación y $C_i(N, L)$ es la fracción molar de la i -ésima componente gaseosa, obtenidas con un modelo de orden N .

Para el cálculo del erro de ajuste entre modelo y datos experimentales (4.3), se considera un modelo de orden N_{pde} , por lo cual queda definido como

$$\varepsilon_f^{\bar{x}ex}(\mathbf{p}_a, N_{pde}) = \varepsilon_d^{\bar{x}ex}(\mathbf{p}, N_{pde}) \quad (\text{B.4})$$

B.2. Para descripción de conjuntos límite

El error paramétrico (3.17) para describir los conjuntos límite (3.9c) se define como

$$\varepsilon_p^S(\tilde{\mathbf{p}}_i) = \sum_{j=1}^{n_p} a_j \varepsilon_{p,j}^S, \quad \varepsilon_{p,j}^S = \sum_{i=1}^{n_\sigma} s_i \varepsilon_{p,j}^{S,i} \quad (\text{B.5a})$$

$$\varepsilon_{p,j}^{S,i} = \sum_{k=1}^{n_E} w_k \left[\frac{1}{L} \int_0^L |\bar{\pi}_k^i(Z; \mathbf{p} \pm \tilde{\mathbf{p}}_j, N_{pde}) - \bar{\pi}_k^i(Z; \mathbf{p}, N_{pde})| dZ \right] \quad (\text{B.5b})$$

Mientras que el error de discretización (3.18) se define como

$$\varepsilon_d^S(\tilde{\mathbf{p}}_j) = \sum_{i=1}^{n_\sigma} s_i \varepsilon_d^{S,i} \quad (\text{B.6a})$$

$$\varepsilon_d^{S,i} = \sum_{k=1}^{n_E} w_k \left[\frac{1}{L} \int_0^L |\bar{\pi}_k^i(Z; \mathbf{p}, N) - \bar{\pi}_k^i(Z; \mathbf{p}, N_{pde})| dZ \right] \quad (\text{B.6b})$$

donde $\varepsilon_{p,j}^S$ es el error paramétrico parcial asociado a la j -ésima variación de un parámetro $\mathbf{p} \pm \tilde{\mathbf{p}}_j$, a_j es un peso para la ponderación, $\tilde{\mathbf{p}}_j$ es el vector de la j -ésima incertidumbre cuyos elementos son cero a excepción del j -ésimo elemento asociado a un parámetro ajustable que posee el valor dado en la Tabla 4.1; $\varepsilon_{p,j}^{S,i}$ (o $\varepsilon_d^{S,i}$) es el error paramétrico (o de discretización) de la i -ésima variable en estado estacionario del conjunto límite S (3.9), s_i es un peso para la ponderación, el término integral es la medida espacial del error paramétrico (o de discretización) del k -ésimo estado, w_k es un peso para la ponderación, $\bar{\pi}_k^i(Z; \mathbf{p}, N)$ es el perfil interpolado de la k -ésima variable en estado estacionario del modelo de orden N

$$\begin{aligned} \bar{\boldsymbol{\pi}}(Z; \mathbf{p}, N) &= [\bar{\pi}_1^i(Z; \mathbf{p}, N), \dots, \bar{\pi}_{n_E}^i(Z; \mathbf{p}, N)]^T \\ &= [\bar{\boldsymbol{\chi}}_{\mathcal{J}}^i(Z; \mathbf{p}, N), \bar{\boldsymbol{\psi}}_{\mathcal{J}}^i(Z; \mathbf{p}, N)]^T \end{aligned} \quad (\text{B.7a})$$

$$\bar{\boldsymbol{\chi}}_{\mathcal{J}}^i(Z; \mathbf{p}, N) = \mathcal{J}_x(Z) \bar{\boldsymbol{x}}_i(\mathbf{p}, N) \quad (\text{B.7b})$$

$$\bar{\boldsymbol{\psi}}_{\mathcal{J}}^i(Z; \mathbf{p}, N) = \mathcal{J}_\zeta(Z) \bar{\boldsymbol{\zeta}}_i(\mathbf{p}, N), \quad i = 1, \dots, n_\sigma \quad (\text{B.7c})$$

donde $\bar{\boldsymbol{x}}_i$ (o $\bar{\boldsymbol{\zeta}}_i$) es el vector con variables de estado dinámicas (o cuasiestáticas) del i -ésimo estado estacionario del modelo de orden N , \mathcal{J}_x (o \mathcal{J}_ζ) es la matriz de interpolación que produce el perfil de estado interpolado $\bar{\boldsymbol{\chi}}_{\mathcal{J}}^i$ (o $\bar{\boldsymbol{\psi}}_{\mathcal{J}}^i$) de la i -ésima variable en estado estacionario $\bar{\boldsymbol{x}}_i$ (o $\bar{\boldsymbol{\zeta}}_i$), n_E es el número total de variables dinámicas y cuasiestáticas en el modelo de orden N , n_σ es el número de estados estacionarios del conjunto límite S (3.9c), n_p es el número de parámetros ajustables en el vector \mathbf{p}_a .

Para el caso de estudio se tiene que $n_p = 6$ ya que se perturban 3 parámetros (cada uno por arriba y por abajo, ver Tabla 4.1), por lo cual el peso $a_j = 1/6$; $n_\sigma = 3$ ya que se consideran los 3 estados estacionarios estables (listados en la Tabla 4.3), por lo cual el peso $s_i = 1/3$; $n_E = 15$ ya que se tienen 5 estados dinámicos y 10 cuasiestáticos, por lo cual el peso $w_k = 1/15$.

B.3. Para descripción de comportamiento transitorio

El error paramétrico (3.21) para describir los conjuntos límite (3.9c) y las trayectorias Ξ (3.13b) se define como

$$\varepsilon_p^{\Xi}(\tilde{\mathbf{p}}_i) = \sum_{j=1}^{n_p} a_j \varepsilon_{p,j}^{\Xi}, \quad \varepsilon_{p,j}^{\Xi}(\tilde{\mathbf{p}}_j) = \sum_{i=1}^{n_m} m_i \varepsilon_{p,j}^{\Xi,i} \quad (\text{B.8a})$$

$$\varepsilon_{p,j}^{\Xi,i} = \sum_{k=1}^{n_E} w_k \left\{ \frac{1}{LT} \int_0^T \left[\int_0^L |\pi_k^i(Z, t; \mathbf{p} \pm \tilde{\mathbf{p}}_j, N_{pde}) - \pi_k^i(Z, t; \mathbf{p}, N_{pde})| dZ \right] dt \right\} \quad (\text{B.8b})$$

Mientras que el error de discretización (3.22) se define como

$$\varepsilon_d^{\Xi}(\tilde{\mathbf{p}}_j) = \sum_{i=1}^{n_m} m_i \varepsilon_d^{\Xi,i} \quad (\text{B.9a})$$

$$\varepsilon_d^{\Xi,i} = \sum_{k=1}^{n_E} w_k \left\{ \frac{1}{LT} \int_0^T \left[\int_0^L |\pi_k^i(Z, t; \mathbf{p}, N) - \pi_k^i(Z, t; \mathbf{p}, N_{pde})| dZ \right] dt \right\} \quad (\text{B.9b})$$

donde $\varepsilon_{p,j}^{\Xi}$ es el error paramétrico transitorio parcial asociado a la j -ésima variación de un parámetro $\mathbf{p} \pm \tilde{\mathbf{p}}_j$, a_j es un peso para la ponderación, $\tilde{\mathbf{p}}_j$ es el vector de la j -ésima incertidumbre cuyos elementos son cero a excepción del j -ésimo elemento asociado a un parámetro ajustable que posee el valor dado en la Tabla 4.1; $\varepsilon_{p,j}^{\Xi,i}$ (o $\varepsilon_d^{\Xi,i}$) es el error paramétrico (o de discretización) de la i -ésima trayectoria del conjunto de trayectorias Ξ (3.13b), m_i es un peso para la ponderación, el término integral es la medida espacio-temporal del error paramétrico (o de discretización) del k -ésimo estado, w_k es un peso para la ponderación, $\pi_k^i(Z, t; \mathbf{p}, N)$ es el perfil interpolado de la k -ésima trayectoria del modelo de orden N

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\pi}_i(Z, t; \mathbf{p}, N) &= [\pi_1^i(Z, t; \mathbf{p}, N), \dots, \pi_{n_E}^i(Z, t; \mathbf{p}, N)]^T \\ &= [\boldsymbol{\chi}_{\mathcal{J}}^i(Z, t; \mathbf{p}, N), \boldsymbol{\psi}_{\mathcal{J}}^i(Z, t; \mathbf{p}, N)]^T \end{aligned} \quad (\text{B.10a})$$

$$\boldsymbol{\chi}_{\mathcal{J}}^i(Z, t; \mathbf{p}, N) = \boldsymbol{\mathcal{J}}_x(Z) \mathbf{x}_i(t; \mathbf{p}, N) \quad (\text{B.10b})$$

$$\boldsymbol{\psi}_{\mathcal{J}}^i(Z, t; \mathbf{p}, N) = \boldsymbol{\mathcal{J}}_{\zeta}(Z) \boldsymbol{\zeta}_i(t; \mathbf{p}, N), \quad i = 1, \dots, n_m \quad (\text{B.10c})$$

donde \mathbf{x}_i (o $\boldsymbol{\zeta}_i$) es el vector con variables de estado dinámicas (o cuasiestáticas) de la i -ésima trayectoria $\boldsymbol{\pi}_i$ del modelo de orden N , $\boldsymbol{\mathcal{J}}_x$ (o $\boldsymbol{\mathcal{J}}_{\zeta}$) es la matriz de interpolación que produce el perfil de trayectoria interpolada $\boldsymbol{\chi}_{\mathcal{J}}^i$ (o $\boldsymbol{\psi}_{\mathcal{J}}^i$) de la i -ésima trayectoria \mathbf{x}_i (o $\boldsymbol{\zeta}_i$), n_m es el número de trayectorias en el conjunto Ξ (3.13b).

Para el caso de estudio se tiene que $n_p = 6$ ya que se perturban 3 parámetros (cada uno por arriba y por abajo, ver Tabla 4.1), por lo cual el peso $a_j = 1/6$; $n_m = 2$ ya que se consideran 2 trayectorias dadas en ecuación (6.1), por lo cual el peso $m_i = 1/2$; $n_E = 15$ ya que se tienen 5 estados dinámicos y 10 cuasiestáticos, por lo cual el peso $w_k = 1/15$.

REFERENCIAS

- Ahmad, A. A., Zawawi, N. A., Kasim, F. H., Inayat, A., y Khasri, A. (2016). Assessing the gasification performance of biomass: A review on biomass gasification process conditions, optimization and economic evaluation. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 53, 1333–1347. doi: 10.1016/j.rser.2015.09.030 1
- Allgower, E. L., y Georg, K. (1990). Numerical continuation methods. An introduction. *Springer Series in Computational Mathematics*, 388. 2, 27
- AllPowerLabs. (2021). *Wiki All power labs*. Descargado 2021-06-05, de <http://www.allpowerlabs.com/> 28, 45, 59
- Atherton, R. W., Schainker, R. B., y Ducot, E. R. (1975). On the statistical sensitivity analysis of models for chemical kinetics. *AIChE Journal*, 21(3), 441–448. doi: 10.1002/aic.690210304 30
- Badillo-Hernandez, U., Alvarez, J., y Alvarez-Icaza, L. (2019, apr). Efficient modeling of the nonlinear dynamics of tubular heterogeneous reactors. *Computers and Chemical Engineering*, 123, 389–406. Descargado de <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0098135418307749?via=ihub> doi: 10.1016/j.compchemeng.2019.01.018 1, 2, 3, 5, 6, 18, 23, 27, 28, 29, 33, 37, 46, 50, 63, 64
- Baldea, M., y Daoutidis, P. (2012). *Dynamics and nonlinear control of integrated process systems* (Vol. 97805211191). doi: 10.1017/CBO9780511978760 14, 18, 28
- Basu, P. (2010). *Biomass gasification and pyrolysis: practical design and theory*. Academic press. 10, 69
- Bergman, T. L., Lavine, A. S., Incropera, F. P., y Dewitt, D. P. (2011). *Introduction to Heat Transfer* (6th ed.). Jhon Wiley & Sons, Inc. 16, 66, 69
- Bhavanam, A., Sastry, R., y cols. (2011). Biomass gasification processes in downdraft fixed bed reactors: a review. *International Journal of Chemical Engineering and Applications*, 2(6), 425–433. 9
- Biagini, E., Barontini, F., y Tognotti, L. (2016). Development of a bi-equilibrium model for biomass gasification in a downdraft bed reactor. *Bioresource Technology*, 201, 156–165. Descargado de <http://dx.doi.org/10.1016/j.biortech.2015.11.057> doi: 10.1016/j.biortech.2015.11.057 3
- Bildea, C. S., Dimian, A. C., y Iedema, P. D. (2001). Multiplicity and stability approach to the design of heat-integrated multibed plug flow reactor. *Computers and Chemical Engineering*, 25(1), 41–48. doi: 10.1016/S0098-1354(00)00631-1 14

- Bindel, D., Friedman, M., Govaerts, W., Hughes, J., y Kuznetsov, Y. A. (2014). Numerical computation of bifurcations in large equilibrium systems in matlab. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 261, 232–248. Descargado de <http://dx.doi.org/10.1016/j.cam.2013.10.034> doi: 10.1016/j.cam.2013.10.034 2
- Bindel, D., Jonkhout C., Govaerts, W., Hughes, J., Kuznetsov, Yu.A., Pekker, M., Veldman, D. (2019). CL MATCONTL2019: continuation toolbox in MATLAB. Descargado de <http://uah.edu/faculty/pekker> 45
- Bizon, K., Continillo, G., Russo, L., y Smuła, J. (2008). On POD reduced models of tubular reactor with periodic regimes. *Computers and Chemical Engineering*, 32(6), 1305–1315. doi: 10.1016/j.compchemeng.2007.06.004 2
- Bryden, K. M., y Ragland, K. W. (1996). Numerical modeling of a deep, fixed bed combustor. *Energy & Fuels*, 10(2), 269–275. 67
- Cacuci, D. G. (2003). *Sensitivity & Uncertainty Analysis, Volume 1*. Chapman and Hall/CRC. doi: 10.1201/9780203498798 30
- Chan, W. C. R., Kelbon, M., y Krieger, B. B. (1985). Modelling and experimental verification of physical and chemical processes during pyrolysis of a large biomass particle. *Fuel*, 64(11), 1505–1513. doi: 10.1016/0016-2361(85)90364-3 67
- Cooper, J., y Hallett, W. (2000). A numerical model for packed-bed combustion of char particles. *Chemical Engineering Science*, 55(20), 4451–4460. 67
- Correa, D. J., y Marchetti, J. L. (1987). Dynamic simulation of shell-and-tube heat exchangers. *Heat Transfer Engineering*, 8(1), 50–59. doi: 10.1080/01457638708962787 19, 28
- De Boor, C. (2001). Calculation of the smoothing spline with weighted roughness measure. *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences*, 11(1), 33–41. doi: 10.1142/S0218202501000726 26
- Deans, H. a., y Lapidus, L. (1960). A computational model for predicting and correlating the behavior of fixed-bed reactors: I. Derivation of model for nonreactive systems. 2, 27
- Deckwer, W. D. (1974). The backflow cell model-applied to non-isothermal reactors. *The Chemical Engineering Journal*, 8(2), 135–144. doi: 10.1016/0300-9467(74)85016-1 27
- de Souza-Santos, M. L. (2010). *Solid fuels combustion and gasification: Modeling, simulation*. CRC Press. 67
- Di Blasi, C. (1996). Heat, momentum and mass transport through a shrinking biomass particle exposed to thermal radiation. *Chemical engineering science*, 51(7), 1121–1132. 67
- Di Blasi, C. (2000). Dynamic behaviour of stratified downdraft gasifiers. *Chemical engineering science*, 55(15), 2931–2944. 5, 14, 34, 38, 50, 64, 67
- Di Blasi, C., y Branca, C. (2013). Modeling a stratified downdraft wood gasifier with primary and secondary air entry. *Fuel*, 104, 847–860. 4, 14, 34
- Doedel, E., Keller, H. B., y Kernevez, J. P. (1991, dec). NUMERICAL ANALYSIS AND CONTROL OF BIFURCATION PROBLEMS (II): BIFURCATION IN INFINITE DIMENSIONS. *International Journal of Bifurcation and Chaos*, 01(04), 745–772. doi: 10.1142/s0218127491000555 1, 27
- Dogru, M., Midilli, A., y Howarth, C. R. (2002). Gasification of sewage sludge using a throated downdraft gasifier and uncertainty analysis. *Fuel Processing Technology*, 75(1), 55–82. 1, 45

- Ferreira, S., Monteiro, E., Brito, P., y Vilarinho, C. (2019). A holistic review on biomass gasification modified equilibrium models. *Energies*, *12*(1), 160. 2
- Gamson. (1951). Heat and mass transfer-fluid solid systems. *Chemical Engineering Progress*, *47*(19). Descargado de https://scholar.google.com.tr/scholar?hl=tr&as_sdt=0%2C5&q=gamson+1951&btnG=&oq=gamso 66
- Ge, X., y Wang, X. (2009). Estimation of freezing point depression, boiling point elevation, and vaporization enthalpies of electrolyte solutions. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, *48*(4), 2229–2235. doi: 10.1021/ie801348c 67
- Gøbel, B., Henriksen, U., Jensen, T. K., Qvale, B., y Houbak, N. (2007). The development of a computer model for a fixed bed gasifier and its use for optimization and control. *Bioresource Technology*, *98*(10), 2043–2052. 18, 28
- Goldman, J., Xieu, D., Oko, A., Milne, R., y Essenhig, R. H. (1985). A comparison of prediction and experiment in the gasification of anthracite in air and oxygen-enriched steam mixtures. En *Symposium (international) on combustion* (Vol. 20, pp. 1365–1372). 66
- Govaerts, W., Kuznetsov, Y. A., De Witte, V., Dhooze, A., Meijer, H., Mestrom, W., ... Sautois, B. (2011). "matcont and cl matcont: Continuation toolboxes in matlab". *venturi.soe.ucsc.edu*. Descargado de <https://venturi.soe.ucsc.edu/sites/default/files/ManualSep2012.pdf> 1, 45
- Groeneveld, M. J., y Van Swaaij, W. (1980). Gasification of char particles with co 2 and h 2 o. *Chemical Engineering Science*, *35*(1), 307–313. 67
- Guangul, F. M., Sulaiman, S. A., y Ramli, A. (2014). Study of the effects of operating factors on the resulting producer gas of oil palm fronds gasification with a single throat downdraft gasifier. *Renewable Energy*, *72*, 271–283. 1
- Gutierrez R., H. J., y Cooper, A. R. (1979). Heat exchanger process dynamics review. *The Chemical Engineering Journal*, *17*(1), 13–18. doi: 10.1016/0300-9467(79)80003-9 19, 28
- Heinemann, R. F., y Poore, A. B. (1981). Multiplicity, stability, and oscillatory dynamics of the tubular reactor. *Chemical Engineering Science*, *36*(8), 1411–1419. doi: 10.1016/0009-2509(81)80175-3 1, 28, 45
- Hlavacek, V. (1970, may). Aspects in Design of Packed Catalytic Reactors. *Industrial and Engineering Chemistry*, *62*(7), 8–26. doi: 10.1021/ie50727a004 18, 28
- Hsi, C. L., Wang, T. Y., Tsai, C. H., Chang, C. Y., Liu, C. H., Chang, Y. C., y Kuo, J. T. (2008). Characteristics of an air-blown fixed-bed downdraft biomass gasifier. *Energy and Fuels*, *22*(6), 4196–4205. doi: 10.1021/ef800026x 45
- Hundsdoerfer, W., y Verwer, J. G. (2003). *Numerical Solution of Time-Dependent Advection-Diffusion-Reaction Equations* (Vol. 33). 25
- Jahromi, R., Rezaei, M., Hashem Samadi, S., y Jahromi, H. (2021). Biomass gasification in a downdraft fixed-bed gasifier: Optimization of operating conditions. *Chemical Engineering Science*, *231*, 116249. Descargado de <https://doi.org/10.1016/j.ces.2020.116249> doi: 10.1016/j.ces.2020.116249 45
- Janajreh, I., y Al Shrah, M. (2013). Numerical and experimental investigation of downdraft gasification of wood chips. *Energy Conversion and Management*, *65*, 783–792. 3, 5, 13, 14, 21, 27, 28, 31
- Jaojaruek, K. (2014). Mathematical model to predict temperature profile and air-fuel equivalence ratio of a downdraft gasification process. *Energy Conversion and Management*, *83*, 223–231. Descargado de <http://dx.doi.org/10.1016/j.enconman>

- .2014.03.016 doi: 10.1016/j.enconman.2014.03.016 27, 28
- Jaree, A., Hudgins, R. R., Budman, H. M., Silveston, P. L., Yakhnin, V. Z., y Menzinger, M. (2003). Hysteresis and extinction waves in catalytic CO oxidation caused by reactant concentration perturbations in a packed-bed reactor. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 42(8), 1662–1673. doi: 10.1021/ie020500w 1
- Jensen, K. F., y Ray, W. H. (1982). The bifurcation behavior of tubular reactors. *Chemical Engineering Science*, 37(2), 199–222. doi: 10.1016/0009-2509(82)80155-3 2
- Jonkhout, C. J. H. (2019). *Numerical Continuation of Limit Cycles in Large Systems with MATLAB* (Tesis Doctoral, University of Leiden). Descargado de https://www.universiteitleiden.nl/binaries/content/assets/science/mi/scripties/master/2018-2019/master_thesis_c_jonkhout_final.pdf 27, 45
- Kakaç, S., Liu, H., y Pramuanjaroenkij, A. (2012). *Heat Exchangers: Selection, Rating, and Thermal Design, Third Edition* (Vol. 6). Descargado de <https://books.google.com/books?hl=en&lr=&id=sJXpvP6xLZsC&pgis=1> 12, 16
- Kashiwagi, T., y Nambu, H. (1992). Global kinetic constants for thermal oxidative degradation of a cellulosic paper. *Combustion and Flame*, 88(3), 345–368. 67
- Keller, H. B. (1977). Numerical Solution of Bifurcation and Nonlinear Eigenvalue Problems. En *Applications of bifurcation theory* (pp. 359–384). Academic. Descargado de <http://ci.nii.ac.jp/naid/10003582824/en/> 27
- Kuznetsov, Y. A. (1998). *Elements of Applied Bifurcation Theory*. Springer New York. doi: 10.1007/b98848 1, 27, 29, 45
- Lafon, A., y Yee, H. C. (1996). Dynamical approach study of spurious steady-state numerical solutions of nonlinear differential equations part IV. Stability vs. methods of discretizing nonlinear source terms in reaction-convection equations. *International Journal of Computational Fluid Dynamics*, 6(2), 89–123. doi: 10.1080/10618569608940776 2
- Levenspiel, O., y Bischoff, K. (1964). Patterns of flow in chemical process vessels. 2, 27
- Li, C., Shen, Y., Wu, J., Dai, Y., y Wang, C.-H. (2019). Experimental and modeling investigation of an integrated biomass gasifier–engine–generator system for power generation and waste heat recovery. *Energy Conversion and Management*, 199, 112023. 3, 13, 14, 28, 31, 46
- Liden, A., Berruti, F., y Scott, D. (1988). A kinetic model for the production of liquids from the flash pyrolysis of biomass. *Chemical Engineering Communications*, 65(1), 207–221. 67
- Liu, Y., y Jacobsen, E. W. (2004). On the use of reduced order models in bifurcation analysis of distributed parameter systems. *Computers and Chemical Engineering*, 28(1-2), 161–169. doi: 10.1016/S0098-1354(03)00183-2 2
- Macak, J., y Malecha, J. (1978). Mathematical model for the gasification of coal under pressure. *Industrial & Engineering Chemistry Process Design and Development*, 17(1), 92–98. 67
- Maneerung, T., Li, X., Li, C., Dai, Y., y Wang, C.-H. (2018). Integrated downdraft gasification with power generation system and gasification bottom ash reutilization for clean waste-to-energy and resource recovery system. *Journal of cleaner production*, 188, 69–79. 12, 13, 28, 31, 46
- Masmoudi, M. A., Halouani, K., y Sahraoui, M. (2017). Comprehensive experimental investigation and numerical modeling of the combined partial oxidation-gasification zo-

- ne in a pilot downdraft air-blown gasifier. *Energy Conversion and Management*, *144*, 34–52. Descargado de <http://dx.doi.org/10.1016/j.enconman.2017.04.040> doi: 10.1016/j.enconman.2017.04.040 3
- Masmoudi, M. A., Sahraoui, M., Grioui, N., y Halouani, K. (2014a). 2-D Modeling of thermo-kinetics coupled with heat and mass transfer in the reduction zone of a fixed bed downdraft biomass gasifier. *Renewable Energy*, *66*, 288–298. 27
- Masmoudi, M. A., Sahraoui, M., Grioui, N., y Halouani, K. (2014b, jun). 2-D Modeling of thermo-kinetics coupled with heat and mass transfer in the reduction zone of a fixed bed downdraft biomass gasifier. *Renewable Energy*, *66*, 288–298. Descargado de <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0960148113006939?via%3Dihub> doi: 10.1016/j.renene.2013.12.016 3, 28
- Mathisen, K. W., Morari, M., y Skogestad, S. (1994). Dynamic models for heat exchangers and heat exchanger networks. *Computers and Chemical Engineering*, *18*, S459–S463. doi: 10.1016/0098-1354(94)80075-8 19, 28
- McKendry, P. (2002). Energy production from biomass (part 1): overview of biomass. *Bioresource technology*, *83*(1), 37–46. 1
- Milligan, J. B. (1994). Downdraft gasification of biomass. (February). Descargado de <https://elibrary.ru/item.asp?id=6865847http://eprints.aston.ac.uk/9695/> 38
- Montuori, L., Vargas-Salgado, C., y Alcázar-Ortega, M. (2015). Impact of the throat sizing on the operating parameters in an experimental fixed bed gasifier: Analysis, evaluation and testing. *Renewable energy*, *83*, 615–625. 1
- Morud, J. C., y Skogestad, S. (1998). Analysis of Instability in an Industrial Ammonia Reactor. *AIChE Journal*, *44*(4), 888–895. doi: 10.1002/aic.690440414 1, 14, 28
- Nisamaneenate, J., Atong, D., Sornkade, P., y Sricharoenchaikul, V. (2015). Fuel gas production from peanut shell waste using a modular downdraft gasifier with the thermal integrated unit. *Renewable energy*, *79*, 45–50. 12, 13, 28, 31
- Ong, Z., Cheng, Y., Maneerung, T., Yao, Z., Tong, Y. W., Wang, C.-H., y Dai, Y. (2015, aug). Co-gasification of woody biomass and sewage sludge in a fixed-bed downdraft gasifier. *AIChE Journal*, *61*(8), 2508–2521. Descargado de <http://doi.wiley.com/10.1002/aic.14836> doi: 10.1002/aic.14836 45
- Prasertcharoensuk, P., Hernandez, D. A., Bull, S. J., y Phan, A. N. (2018). Optimisation of a throat downdraft gasifier for hydrogen production. *Biomass and bioenergy*, *116*, 216–226. 3
- Puig-Arnavat, M., Bruno, J. C., y Coronas, A. (2010). Review and analysis of biomass gasification models. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, *14*(9), 2841–2851. doi: 10.1016/j.rser.2010.07.030 2
- Puszynski, J., y Hlaváček, V. (1980). Experimental study of traveling waves in nonadiabatic fixed bed reactors for the oxidation of carbon monoxide. *Chemical Engineering Science*, *35*(8), 1769–1774. doi: 10.1016/0009-2509(80)85013-5 1, 28
- Ramos, A., Monteiro, E., y Rouboa, A. (2019, aug). *Numerical approaches and comprehensive models for gasification process: A review* (Vol. 110). Pergamon. Descargado de <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1364032119302606> doi: 10.1016/j.rser.2019.04.048 2
- Reed, T., y Das, A. (1988). *Handbook of biomass downdraft gasifier engine systems*. Biomass Energy Foundation. 9
- Reed, T. B., y Markson, M. (1985). Biomass Gasification Reaction Velocities. En *Funda-*

- mentals of thermochemical biomass conversion* (pp. 951–965). Springer Netherlands. doi: 10.1007/978-94-009-4932-4_53 38
- Roberts, A. (1970). A review of kinetics data for the pyrolysis of wood and related substances. *Combustion and flame*, 14(2), 261–272. 67
- Rodriguez-Alejandro, D., Zaleta-Aguilar, A., Rangel-Hernández, V., y Olivares-Arriaga, A. (2018). Numerical simulation of a pilot-scale reactor under different operating modes: Combustion, gasification and pyrolysis. *Biomass and bioenergy*, 116, 80–88. 3, 13, 28, 31
- Safarian, S., Unnthórsson, R., y Richter, C. (2019, aug). A review of biomass gasification modelling. , 110, 378–391. Descargado de <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1364032119303090> doi: 10.1016/j.rser.2019.05.003 2
- Saidur, R., Abdelaziz, E., Demirbas, A., Hossain, M., y Mekhilef, S. (2011). A review on biomass as a fuel for boilers. *Renewable and sustainable energy reviews*, 15(5), 2262–2289. 9
- Sansaniwal, S., Pal, K., Rosen, M., y Tyagi, S. (2017, may). Recent advances in the development of biomass gasification technology: A comprehensive review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 72, 363–384. doi: 10.1016/J.RSER.2017.01.038 1, 11
- Sarker, S., y Nielsen, H. K. (2015). Assessing the gasification potential of five woodchips species by employing a lab-scale fixed-bed downdraft reactor. *Energy Conversion and Management*, 103, 801–813. Descargado de <http://dx.doi.org/10.1016/j.enconman.2015.07.022> doi: 10.1016/j.enconman.2015.07.022 45
- Seydel, R. (2010). Practical bifurcation and stability analysis: Third edition. En *Interdisciplinary applied mathematics* (Vol. 5, pp. 1–473). New York, NY: Springer New York. Descargado de <http://link.springer.com/10.1007/978-1-4419-1740-9> doi: 10.1007/978-1-4419-1740-9 27, 29, 45
- Shen, Y., Li, X., Yao, Z., Cui, X., y Wang, C.-H. (2019). Co2 gasification of woody biomass: Experimental study from a lab-scale reactor to a small-scale autothermal gasifier. *Energy*, 170, 497–506. 1, 12, 13, 28, 31
- Simone, M., Nicoletta, C., y Tognotti, L. (2013). Numerical and experimental investigation of downdraft gasification of woody residues. *Bioresource technology*, 133, 92–101. 3, 5, 27, 28, 38, 50, 64
- Soares, J., y Oliveira, A. C. (2020). Experimental assessment of pine wood chips gasification at steady and part-load performance. *Biomass and Bioenergy*, 139(October 2019). doi: 10.1016/j.biombioe.2020.105625 45
- Speight, J. G. (2020). *Handbook of Gasification Technology*. doi: 10.1002/9781118773970 1
- Yan, W. C., Shen, Y., You, S., Sim, S. H., Luo, Z. H., Tong, Y. W., y Wang, C. H. (2018). Model-based downdraft biomass gasifier operation and design for synthetic gas production. *Journal of Cleaner Production*, 178, 476–493. Descargado de <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2018.01.009> doi: 10.1016/j.jclepro.2018.01.009 3, 21
- Yucel, O., y Hastaoglu, M. A. (2016). Kinetic modeling and simulation of throated downdraft gasifier. *Fuel Processing Technology*, 144, 145–154. 2, 3, 4, 5, 13, 21, 27, 28, 31, 33, 34, 36, 37, 47, 59, 60